

過冷デンドライト成長モデルの検討

解析解による記述と界面安定性基準の導入について

姫 宮 利 融

目 次

1. 緒 言

*List of Symbols

2. И в а н ц о в の等温解からTrivediの解へ

2.1 「過冷デンドライト」の理論モデル

—Г. П. И в а н ц о в の等温解—

2.1.1 И в а н ц о в の論文

2.1.2 回転放物体座標

2.1.3 И в а н ц о в の式の書きなおしと検討

2.2 И в а н ц о в の解の別の導出方法

2.2.1 定常状態条件での熱伝導の基礎方程式の導出

2.2.2 И в а н ц о в の解の導出

2.3 Т е м к и н の仮定

2.4 Trivediの解

3. 最大成長速度の仮定と摂動論

3.1 最大成長速度の仮定と実験結果

3.2 エントロピー成長最小原理から考える

3.3 界面の形成的安定性——摂動論

4. デンドライトの幾何学的形状はどのようにして決定されるのか？

4.1 核生成

4.2 界面の摂動

4.3 境界層モデルによる近似

5. 結言

／謝辞／

Appendix A, B, C, D

Reference

1. 緒 言

金属材料は、ほとんどすべて溶融状態で精錬されて、凝固し鑄塊（インゴット）となる。実用金属材料は多かれ少なかれ合金成分を有する（例えば、不純物としても）多成分合金であり、その凝固組織はマクロ的、ミクロ的不均一性を有する。それらを列挙すれば、マクロ偏析、結晶粒（それに伴う粒界偏析）、デンドライト組織、共晶組織、包晶組織、（これらにあい伴うミクロ偏析）などである。製品の製造を行う過程で直接に溶融状態を通過する鑄造や溶接などで凝固現象の果たす役割の重要さは言うまでもなく、（一度高温で）凝固に伴って形成されたマクロな不均一性はそれより低温で均一化处理（homogenization）を施しても容易に改善しないことから、凝固現象を理解することの重要性が示される。

凝固現象の理解の基本となるのはデンドライト・共晶など基本的な凝固組織の形態(morphology)、大きさ(size)、界面における過冷度(supercooling)を、その合金系の物理定数——平衡状態図で示される各々の値、凝固潜熱、各相の比熱など——と凝固パラメーターすなわち温度勾配： G と凝固速度（成長速度）： V の函数として記述し説明することである。上記の「函数として記述する」という命題は2つの要請に答えなければならない。1つは、自然現象やその構成要件を単純化した実験結果に適合するものでなくてはならない。2つはそこに導入された物理的仮定のもつ意味が明確であり、物理的な説明のつくものでなくてはならない。

金属のデンドライトおよび共晶組織の物理的記述は結晶成長——それは原子が特定の格子系をつくり原子レベルでの特定の方位の結びつきやすさがマクロな結晶の形となって現れる——一般の問題である。さらに広く言えば、自然界における自己秩序としてのパターン形成での問題である。

本稿では第一にИванцовによる等温デンドライトの記述からTrivediの解までの詳細なノートを示す。これは後で述べるが過冷デンドライトの問題である。Trivediらが行った最大成長速度の仮定は実験結果と一致しないため妥当な仮定ではないとされているがデンドライトを記述する数学モデルとして

歴史的な意義をもつであろう。

第二に、最大成長速度の仮定に替わって摂動論による形態的安定性が導入されるわけであるが、その意義を考察する。

第三に、これらのモデルではデンドライトの幾何学的形状——回転放物体、回転楕円体の半分+円柱——などを予め仮定してある。しかし、「何故そのような幾何学的形状が決定されるのか」を提示せず一種の「結論の繰り込み」を行っていると考ええる。従って、幾何学的形状決定のこころみについて述べたい。

List of Symbols

c_1, c_2, c_3, \dots	integration constant
C_1, C_2, C_3, \dots	integration constant
c_L	specific heat capacity per unit volume in liquid
C_o	solute concentration in solid
C_e	equilibrium solute concentration at planar solid-liquid interface
C_∞	solute concentration in liquid far from interface
D_{th}	thermal diffusivity
D	diffusion coefficient of solute
d_o	capilarity length $\left(= \frac{c_L T_M \sigma}{Q^2} \right)$
e	unit normal vector of surface (in Appendix A)
$E_{i(x)}$	integral exponential function
E	first fundamental quantity of surface
$f(T)$	arbitrary function of T (in § 2.1)
$f(x)$	function of x ($=p_i \eta^2$) (in § 2.4 eq. 4.14)
F	first fundamental quantity of surface (in Appendix A)
$F(T)$	$= \frac{dT_L}{d\xi}$ (in § 2.1)
$F_i(\xi)$	$U_i(\xi, \eta) = F_i(\xi) G_i(\eta)$ (in § 2.4)
$g(\xi)$	$= \int \frac{dT}{f(T)}$ (in § 2.2)
G	first fundamental quantity of surface (in Appendix A)
$\mathfrak{G}_{2n}(x)$	$= \int_0^\infty t^{2n} e^{-(t+x)^2} dx$ (in Appendix C)
$G_i(\eta)$	$U_i(\xi, \eta) = F_i(\xi) G_i(\eta)$ (in § 2.4)

H	mean curvature of surface (in § 2.3, Appendix A)
i	unit vector along x -axis
$I_{2n} \operatorname{erfc}(x)$	normalized integral error function (see Appendix C)
I_1	$= \frac{1}{n!} \int_0^\infty e^{-t^n} \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-2\sqrt{pt}} dt$ (in § 2.4)
j	unit vector along y -axis
J	hert flux
$J_\nu(x)$	bessel function of the first kind
k	unit vector along z -axis
$K_\nu(x)$	modified Bessel function
L	liquid
L	second fundamenal quantity of surface (in Appendix A)
\mathcal{L}_1	$= \lambda_2 [n_1 + \lambda_1 m_2 / \lambda_2] / \gamma$ (in § 2.3)
\mathcal{L}_2	$[\lambda_2 T_M / (\gamma_1 Q')^2] (n_2 + \lambda_1 m_2 / \lambda_2)$ (in § 2.3)
$L_n^0(x)$	Laguerre function $(= e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) = n! \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k}{k} \binom{n}{k} x^k)$
$\hat{L}^1(p, n)$	see § 2.4(4.28a)
$\hat{L}^2(p, n)$	see § 2.4(4.28b)
M	second fundamental quantity of surfase (in Appendix A)
m_1	≈ 0.60
m_2	≈ 2.08
$\hat{M}^1(p_s, \eta)$	see § 2.4(4.27c)
$\hat{M}^2(p_s, \eta)$	see § 2.4(4.27d)
n	natural number, integer $= 1.21$ (specially in 2.3)
n_1	≈ 1.33
n_2	≈ 3.86
$\hat{N}^1(p_L, \eta)$	see § 2.4(4.27a)
$\hat{N}^2(p_L, \eta)$	see § 2.4(4.27b)
p	position vector

p_i	pecllet number $\left(= \frac{2V\rho}{D_{th}} \right)$
Q	latent heat of fusion per unit volume
Q'	latent hert of fusion per unit mass
r	radius component of polar coordinate system
R	radius of liquid–solid interface
S	solid
t	time, parameter
T	temperature
T_i	actual temperature of sold–liquid interface
T_L	temperature in liquid
$T'_L(\xi)$	Ivantsov's solution $\left(= T_\infty + (T_M - T_\infty) \frac{E_i(-p_L \xi^2)}{E_i(-p_L)} \right)$
T_M	melting point
T_s	temperature in solid
T_∞	temperature in liquid far from interface
ΔT	suppercooling
u	dimensionless temperature parameter
$U_s(\xi, \eta)$	$= T_s(\xi, \eta) - T_M$
$U_L(\xi, \eta)$	$= T_L(\xi, \eta) - T'_L(\xi)$
V	growth rate of needle normal to interface
W_j	$= J$
x	component of Cartesian coordinate system
y	component of Cartesian coordinate system
z	component of Cartesian coordinate system z-axis is along growth direction
z'	$z' = z - Vt$

Greek

α, α'	constant
α	$=0.457$ (in § 2.3)
β, β'	constant
γ_1	mass density of solid
γ_2	mass density of liquid
$\Gamma(x)$	gamma function
Γ	Gibbs–Thomson coefficient
Γ_c	Gibbs–Thomson coefficient of solute
δ_{im}	amplitude of perturbation (in 4.2)
ζ	$= \frac{2D_{th} C_L T_M \sigma}{Q^2 V \rho^2}$
θ	angular component of paraboloid revolution coordinate system (see fig.3) angular component of polar coordinate system
η	second component of paraboloid revolution coordinate system (see fig.3)
λ_i	thermal conductivity
ξ	first component of paraboloid revolution coordinate system (see fig . 3)
π	circular constant
ρ	curvature radius at the tip of the parabolic revolution
σ	surface energy of liquid–solid interface
$\sigma[S]$	entropy production
ϕ	second angular component of polar coordinate system
$\Phi(a, \gamma ; z)$	confluent hypergeometric function of first kind
$\Psi(a, \gamma ; z)$	confluent hypergeometric function of second kind

2. И в а н ц о в の等温解から T r i v e d i の解へ

2.1 「過冷デンドライト」の理論モデル

——Г. П. И в а н ц о в の等温解——

まずはじめに、「過冷デンドライト」の成長という問題の内容を明らかにする。対象とする物質は純物質（純金属）である。純物質の溶融点（凝固点）は液相と固相が熱力学的平衡状態で共存する温度であり、有限な速さ（ m^3/s ）で凝固が進行するための駆動力をもたない。ある大きさの溶湯過冷が存在するときはじめて凝固は進行する。（もちろん、これとは反対に鑄型壁が凝固点以下に冷却されていて、液相→固液界面→固相→鑄型壁という向きの熱流によって抜熱が行われることもある。）一様に過冷した溶湯中にたまたま微小な固相＝核が発生したとき、核から溶湯中にデンドライトが成長する。このデンドライトの成長を定常とみなし（溶湯は十分に大きく凝固の進行が温度場に影響しないとし）、溶湯過冷度 ΔT の函数として、温度場、成長速度、デンドライト形状を記述するのが「過冷デンドライト」の問題である。

2.1.1 И в а н ц о в の論文

過冷デンドライトの理論モデルの出発点は、Г. П. И в а н ц о в の論文 [1] である。この論文は第二次世界大戦後でソ連の論文の流通の悪い時期に発表されたこと、解の導入に「発見的な」方法を用いていることから、あらためて検討を行いたい。

И в а н ц о в の論文 [1] は、「過冷した溶湯より成長する球形、円筒形、あるいは針状の結晶の周囲の温度場」という題目で、「以下の条件で過冷した溶湯での一つの(或る)結晶(の成長)は記述される。」という文より始まる。条件の設定 = 課題の定式化は、

固相で $T = T_M$

液相で、定常でフーリエ方程式を満足する

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D_{th} \nabla^2 T \quad (1.2)$$

無限遠方で

$$T = T_\infty \quad (T_M > T_\infty) \quad (1.3)$$

相境界上で

$$T = T_M \quad (\text{界面過冷なし}) \quad (1.4)$$

$$-\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{TM} = Q \left(\frac{dn}{dt} \right)_{TM} \quad (1.5)$$

(1.5) 式は界面における熱収支の式である。(1.5) 式で

$$\begin{aligned} \frac{Q}{\lambda} &= - \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right) \bigg/ \left(\frac{dn}{dt} \right) \\ &= - \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right) \bigg/ \left(\frac{\partial T}{\partial t} \bigg/ \frac{\partial T}{\partial n} \right) \\ &= - \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^2 \bigg/ \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

として、

$$\left[\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 \right]_{T_M} = - \frac{Q}{\lambda} \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_{T_M} \quad (1.6)$$

(1.6) 式は任意の温度函数 $f(T)$ を使って、微分方程式：

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 = f(T) \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.7)$$

が成立している一般解をみたく特別な場合と見なされる。

従って、課題の構成は次のようになる。

「微分方程式 (1.2), (1.7) と境界条件 (1.3) (1.4) (1.6) を満足するところの結晶化のすべての表面と液相の温度場を記述すること。」

方程式 (1.7) の積分は、ラグランジェーシャルプによって

$$\frac{1+C_1^2+C_2^2}{C_3} F(T) = x + C_1 y + C_2 z + C_3 t + C_4 \quad (1.8)$$

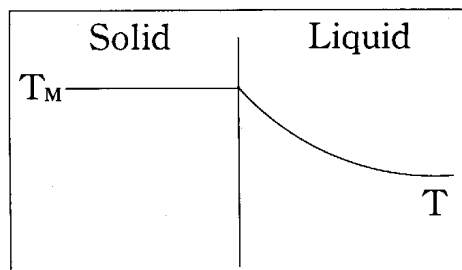


Fig. 1 Schematic illustration of temperature profile for Ivantsov model

ここで

$$F(T) = \int \frac{dT}{f(T)}$$

ここから

$$T = \Phi(x_1 + C_1 y + C_2 z + C_3 t + C_4)$$

という形がでてくる。これは、方程式(1.2)を満足する。

以下、Иванцовは(1.8)式の特別な場合として、 Φ の外観を決める作業を行い、球形・円筒形の結晶につづいて、針状の結晶を考察する。

ここで、

$$T = \Phi(-z - mt + \sqrt{r^2 + (z + mt)^2}) \quad (1.9)$$

がその特殊な場合として示される。「この場合、表面の温度場は中心点からの回転放物体であることがわかり、そして、平面の場合は、中心からの放物体柱

であることがわかる。」(1.9)式を(1.1)式に代入し、(1.3)式、(1.5)式、(1.4)式で定数を決定して

$$\frac{T - T_{\infty}}{T_M - T_{\infty}} = \frac{E_i\left(-\frac{VR}{2D_{th}}w\right)}{E_i\left(-\frac{VR}{2D_{th}}\right)} \quad (1.10)$$

ここで

$$w = \sqrt{\frac{x^2 + y^2}{\rho^2} + \left(\frac{z - Vt}{\rho}\right)^2} + \frac{z - Vt}{\rho} \quad (1.11)$$

なお、 ρ は回転放物体の「半径」で、

$$\begin{aligned} t = t_0 \quad \text{で} \quad x = x_0, \quad y = y_0, \quad z = z_0 \quad \text{の点が} \\ w = 1 \quad (\text{相境界上}) \quad \text{にあるとき、} \\ \rho = \sqrt{x_0^2 + y_0^2 + z_0^2} \end{aligned} \quad (1.12)$$

で示される。

媒介変数 $V\rho / 2D_{th}$ ($=P_L$: Pectet数) は、

$$-p_L e^{p_L} Ei(-p_L) = \frac{T_M - T_{\infty}}{Q} c_L \quad (1.13)$$

で決定される。これは、界面における熱収支の計算より導かれ、2.1.3節で導出する。

本項の最後に、(1.10), (1.11)でデカルト座標で記述されている $(x, y, z - Vt)$ が界面で回転放物体であることを示そう。まず、

$$z' = z - Vt \quad (1.14)$$

と変換すると、 z' は速さ V で成長する界面と共に移動する座標系での座標を示すことになる。(1.11)式を書きかえて、

$$w = \sqrt{\frac{x^2 + y^2 + z'^2}{\rho^2}} + \frac{z'}{\rho} \quad (1.15)$$

明らかに、(1.10) 式で $w = 1$ ならば $T = T_M$ で界面を表わす。従って、

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{x^2 + y^2 + z'^2}{\rho^2}} + \frac{z'}{\rho} &= 1 \\ \frac{x^2 + y^2 + z'^2}{\rho^2} &= \left(1 - \frac{z'}{\rho}\right)^2 \\ x^2 + y^2 + z'^2 &= \rho^2 \left(1 - \frac{2z'}{\rho} + \frac{z'^2}{\rho^2}\right) \\ z' &= \frac{\rho}{2} - \frac{x^2 + y^2}{2\rho} \end{aligned} \quad (1.16)$$

(1.12) の表記を借りると、

$$z'_0 = \frac{\rho}{2} - \frac{x_0^2 + y_0^2}{2\rho} \quad (1.17)$$

2.1.2 回転放物体座標

(1.16) 式、(もしくは (1.17) 式) から、界面が回転放物体であることがわかるから、(1.15) 式を回転放物体座標で書きかえ、(1.10) 式を回転放物体座標で表現するのが自然である。

ここで、後の節のことも考え、回転放物体座標の導入を行なう。

2つの放物線

$$z_1 = \frac{1}{2\rho\xi^2}(-x^2 + \rho^2\xi^4), (\rho > 0) \quad (1.20)$$

$$z_2 = \frac{1}{2\rho\eta^2}(x^2 - \rho^2\eta^4), (\rho > 0) \quad (1.21)$$

の交点によって座標を定義することを考える。(この段階では、 ξ , η は放物線の形状を決める幾何学的パラメータにすぎない。) 実際 (1.20), (1.21) を連立させて $z = z_1 = z_2$ とすると、

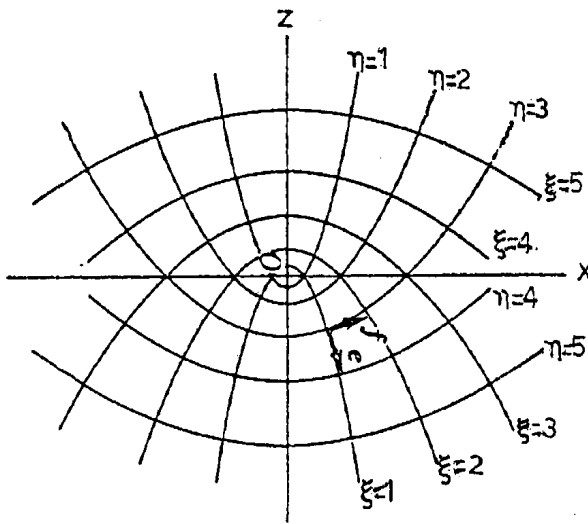


Fig.2 Palabolic coodinate and Cartesian coodinate (from Ref.[2])

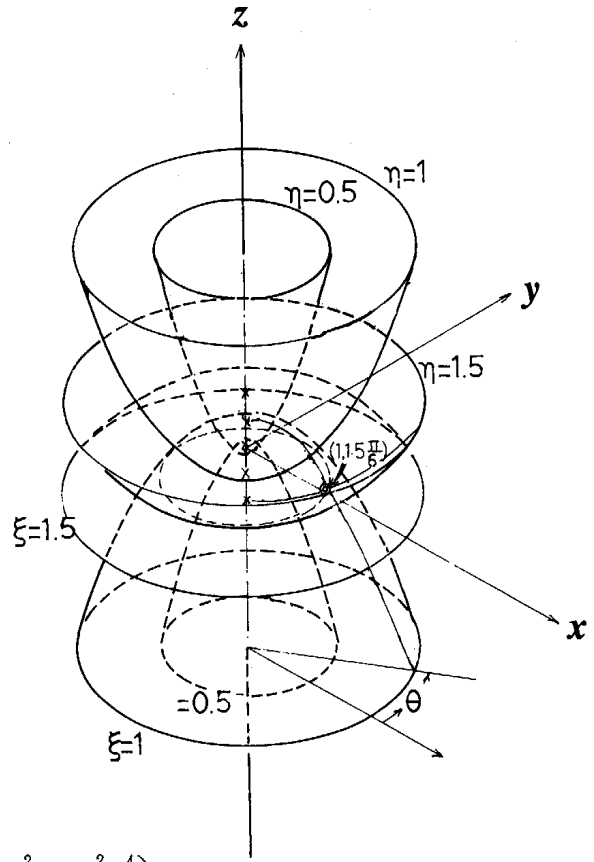


Fig.3 Coodinate System of Palabolic Coodinate

$$\frac{1}{2\rho\xi^2}(-x^2 + \rho^2\xi^4) = \frac{1}{2\rho\eta^2}(x^2 - \rho^2\eta^4)$$

$$\eta^2(-x^2 + \rho^2\xi^4) = \xi^2(x^2 - \rho^2\eta^4)$$

$$(\xi^2 + \eta^2)x^2 - \rho^2(\xi^4\eta^2 + \xi^2\eta^4) = 0$$

$$(\xi^2 + \eta^2)(x^2 - \rho^2\xi^2\eta^2) = 0$$

従って

$$x = \rho\xi\eta$$

(1.20) 式に代入して

$$z = \frac{\rho}{2}(\xi^2 - \eta^2)$$

となる。そのイメージは $\rho = 1$ のとき、Fig. 2で示される。

同様に、3次元空間において、

$$\begin{aligned} x &= \rho\xi\eta\cos\theta \\ y &= \rho\xi\eta\sin\theta \\ z &= \frac{\rho}{2}(\xi^2 - \eta^2) \end{aligned} \tag{1.22}$$

という座標変換によって、回転放物体座標 (ξ, η, θ) を定義することができる。(Fig. 3)

これ以降、デカルト座標で記述されていた函数を回転放物体座標 (ξ, η, θ) で記述することになる。熱伝導の方程式にはラプラシアン (∇^2) が出てくるからこれを新しい座標系、即ち回転放物体座標で表す方法を知らなければならぬ。

一般にデカルト座標 (x, y, z) を (u_1, u_2, u_3) に変換した場合。

$$h_1 = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_1} \right|, h_2 = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_2} \right|, h_3 = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_3} \right|$$

として、

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial u_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \Psi}{\partial u_1} \right) + \frac{\partial}{\partial u_2} \left(\frac{h_3 h_1}{h_2} \frac{\partial \Psi}{\partial u_2} \right) + \frac{\partial}{\partial u_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial \Psi}{\partial u_3} \right) \right]$$

である。([2] , p. 24~25)

回転放物体座標の場合

$$\begin{aligned} h_1^2 &= \left(\frac{\partial x}{\partial u_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u_1} \right)^2 \\ &= (\rho \eta \cos \theta)^2 + (\rho \eta \sin \theta)^2 + (\rho \xi)^2 \\ &= \rho^2 (\xi^2 + \eta^2) \end{aligned}$$

$$h_1 = \rho \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$$

$$\begin{aligned} h_2^2 &= \left(\frac{\partial x}{\partial u_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u_2} \right)^2 \\ &= (\rho \xi \cos \theta)^2 + (\rho \xi \sin \theta)^2 + (-\rho \eta)^2 \\ &= \rho^2 (\xi^2 + \eta^2) \end{aligned}$$

$$h_2 = \rho \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$$

$$\begin{aligned} h_3^2 &= \left(\frac{\partial x}{\partial u_3} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u_3} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u_3} \right)^2 \\ &= (-\rho \xi \eta \sin \theta)^2 + (\rho \xi \eta \cos \theta)^2 + \sigma^2 \\ &= \rho^2 \xi^2 \eta^2 (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \end{aligned}$$

$$h_3 = \rho \xi \eta$$

$$\frac{1}{h_1 h_2 h_3} = \frac{1}{\rho^2 (\xi^2 + \eta^2) \rho \xi \eta} = \frac{1}{\rho^3 (\xi^2 + \eta^2) \xi \eta}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial u_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \Psi}{\partial u_1} \right) &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho \xi \eta \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right) = \rho \eta \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} + \rho \xi \eta \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} \\ &= \rho \xi \eta \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right) \\ \frac{\partial}{\partial u_2} \left(\frac{h_3 h_1}{h_2} \frac{\partial \Psi}{\partial u_2} \right) &= \rho \xi \eta \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \right) \\ \frac{\partial}{\partial u_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial \Psi}{\partial u_3} \right) &= \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\rho^2 (\xi^2 + \eta^2)}{\rho \xi \eta} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) = \frac{\eta (\xi^2 + \eta^2)}{\xi \eta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2}\end{aligned}$$

従って

$$\begin{aligned}\nabla^2 \Psi &= \frac{1}{\rho^3 (\xi^2 + \eta^2) \xi \eta} \left[\rho \xi \eta \frac{1}{\xi} \frac{1}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right) + \rho \xi \eta \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\rho (\xi^2 + \eta^2)}{\xi \eta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} \right] \\ &= \frac{1}{\rho^2 (\xi^2 + \eta^2)} \left[\frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\rho^2 \xi^2 \eta^2} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \\ &\hspace{15em} (1.23)\end{aligned}$$

後述するが $\frac{\partial \Psi}{\partial z}$ も導かなければならない。

$$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \frac{\partial z}{\partial \theta}$$

まず、

$$\frac{\partial z}{\partial \theta} = 0$$

座標変換の式より

$$\xi^2 - \eta^2 = \frac{2z}{\rho}$$

$$2\xi \frac{\partial \xi}{\partial z} - 2\eta \frac{\partial \eta}{\partial z} = \frac{2}{\rho}$$

(1.24-1)

$$\text{また } x^2 + y^2 = \rho^2 \xi^2 \eta^2$$

$$2\rho^2 \xi \eta^2 \frac{\partial \xi}{\partial z} + 2\rho^2 \xi^2 \eta \frac{\partial \eta}{\partial z} = 0$$

$$\eta \frac{\partial \xi}{\partial z} + \xi \frac{\partial \eta}{\partial z} = 0$$

(1.24-2)

(2.24-1) と (2.24-2) を連立して

$$\frac{\partial \xi}{\partial z} = \frac{\xi}{\rho(\xi^2 + \eta^2)}, \quad \frac{\partial \eta}{\partial z} = -\frac{\eta}{\rho(\xi^2 + \eta^2)}$$

従って

$$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = \frac{1}{\rho(\xi^2 + \eta^2)} \left(\xi \frac{\partial \Psi}{\partial z} - \eta \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \right)$$

(1.25)

2.1.3 Иванцовの解の書きなおしと検討

Иванцовの解、(1.10), (1.11)を回転放物体座標を使って書きかえ、(1.13)式を導出する。

(1.22) 式より

$$x = \rho \xi \eta \cos \theta$$

$$y = \rho \xi \eta \sin \theta$$

$$z' = \frac{\rho}{2} (\xi^2 - \eta^2)$$

を(1.15)式に代入する。ここで z の代わりに z' を使っているのは回転放物体の座標系も界面に伴って移動させていることを含んでいる。

$$\begin{aligned}
w &= \sqrt{\frac{1}{\rho^2}(\rho^2 \xi^2 \cos^2 \theta + \rho^2 \xi^2 \eta^2 \sin^2 \theta) + \frac{1}{4}(\xi^2 - \eta^2)^2} + \frac{1}{2}(\xi^2 - \eta^2) \\
&= \sqrt{\xi^2 \eta^2 + \frac{1}{4}(\xi^4 - 2\xi^2 \eta^2 + \eta^4)} + \frac{1}{2}(\xi^2 - \eta^2) \\
&= \sqrt{\frac{1}{4}(\xi^2 + \eta^2)^2} + \frac{1}{2}(\xi^2 - \eta^2) \\
&= \xi^2
\end{aligned}$$

従って

$$\frac{T - T_\infty}{T_M - T_\infty} = \frac{Ei\left(-\frac{V\rho}{2D_{th}} \xi^2\right)}{Ei\left(-\frac{V\rho}{2D_{th}}\right)} \quad (1.26)$$

これが一般的にИванцовの解として知られるものであるが、 $\xi = 1$ の界面のみならず、 $\xi = \text{constant}$ の回転放物体の曲面上で当温である。

Иванцовの解で残っているのは、媒介変数 $p_L = V\rho / 2D_{th}$ を求めることである。これは界面における熱収支の式(1.5)より導かれるが、まずその一般形を書き表わそう。界面の法線ベクトルが z' 軸の正の向きとなす角を ϕ 、界面の法線方向の移動速度を V_n として、界面の各点で、

$$\frac{V_n}{\cos \phi} Q = -\lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z'} \Big|_\Gamma + \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial z'} \Big|_\Gamma \quad (1.27)$$

が成り立たなければならない。(1.27)は湧き出しと流れの項よりなるエネルギー保存則になっている。Иванцовの場合、

$$\frac{\partial T_s}{\partial z'} \Big|_\Gamma = 0$$

で、かつ

$$\frac{V_n}{\cos \phi} = V$$

であるから、

$$QV = -\lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z'} \Big|_r \quad (1.28)$$

となる。

$$T = T_\infty + (T_M - T_\infty) \frac{Ei(-p_L \xi^2)}{Ei(-p_L)}$$

$$z' = \frac{\rho}{2} (\xi^2 - \eta^2)$$

を使って $\partial T_L / \partial z' |_r$ を計算する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_L}{\partial z'} &= \frac{\partial T_L}{\partial \xi^2} \frac{\partial \xi^2}{\partial z'} + \frac{\partial T_L}{\partial \eta^2} \frac{\partial \eta^2}{\partial z'} \\ &= (T_M - T_\infty) \cdot \frac{1}{Ei(-p_L)} \cdot \frac{e^{-p_L \xi^2}}{p_L \xi^2} \cdot p_L \cdot \frac{2}{\rho} + 0 \end{aligned}$$

ここで

$$Ei(-x) = -\int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt = \int_\infty^x \frac{e^{-t}}{t} dt$$

を使った。界面では $\xi = 1$ であるから

$$QV = -\lambda_L (T_M - T_\infty) \frac{2e^{-p_L}}{\rho Ei(-p_L)}$$

ここで

$$V = \frac{2D_{th} p_L}{\rho}$$

を代入して

$$\frac{2p_L D_{th} Q}{\rho} = -\lambda_L (T_M - T_\infty) \frac{2e^{-p_L}}{\rho Ei(-p_L)}$$

また、

$$D_{th} = \lambda_L / c_L$$

であるから

$$\begin{aligned}
 -p_L Q E i(-p_L) &= \lambda_L \cdot \frac{c_L}{\lambda_L} (T_M - T_\infty) e^{-p_L} \\
 -p_L e^{p_L} E i(-p_L) &= \frac{(T_M - T_\infty) c_L}{Q}
 \end{aligned} \tag{1.29}$$

これで、(1.13) 式を導出した。

以上を総括すると、Иванцовの仕事は、1) 過冷している溶湯中で定常的な熱伝導によって成長する結晶の成長の方程式を提示し、2) 境界上の熱収支を表す境界条件を一般化して非線形微分方程式を導き、その一般解を導いた。3) 2) の特別な場合として、球状、円筒状、針状の場合についての温度場の式を「発見」し、針状の場合、表面の温度場が回転放物体であることをしめした。4) 針状の場合について。成長速度： V と回転放物体の半径： ρ の間の関係（(1.13) 式）を示した、もちろん、この関係からは、 V 、 ρ はそれぞれ一意に決まらない。

2.2 Иванцовの解の別の導出方法

Иванцовの解 (1.10), (1.11) もしくは (1.26) は、はじめから回転放物体座標で微分方程式を記述し導出することができる。むしろ、その方法の方がよく知られている。Темкин, Trivediらとの関係があるので紹介する。

2.2.1 定常状態条件での熱伝導の基礎方程式の導出

速さ V で z 方向に界面が移動してあり、熱移動が定常状態を保つとき、熱伝導は次のように表される。

$$\nabla^2 T + \frac{V}{D_{th}} \frac{\partial T}{\partial z'} = 0 \quad (2.1)$$

界面と共に移動する z に平行な座標 z' を使った。

これは次のようにして考えることができる。 [5]

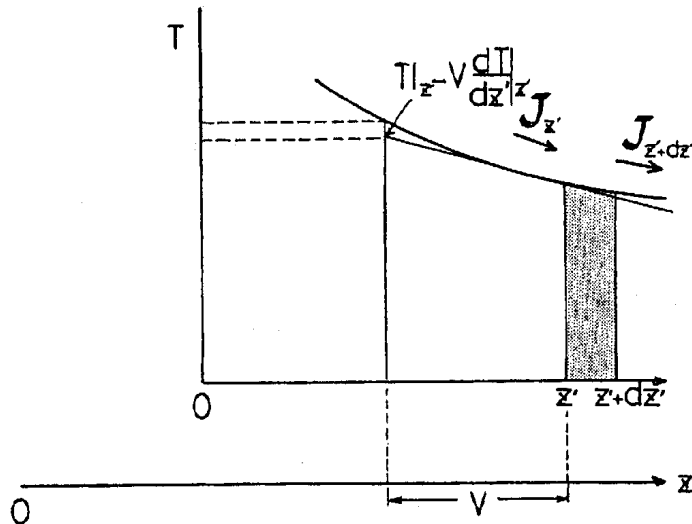


Fig. 4 Heat balance in steady-state condition

界面と共に移動する座標系で z' のみの函数として温度があらわされるとする。面 z' で z' の正の向きの熱流束は

$$J_{z'} = -\lambda \left. \frac{dt}{dz'} \right|_{z'}$$

面 $z' + dz'$ での熱流束は

$$J_{z'+dz'} = -\lambda \left. \frac{dt}{dz'} \right|_{z'+dz'}$$

従って単位時間当りこの体積素片には

$$\begin{aligned} J_{z'} - J_{z'+dz'} &= \lambda \left(\left. \frac{dt}{dz'} \right|_{z'+dz'} - \left. \frac{dt}{dz'} \right|_{z'} \right) \\ &= \lambda \left[\left(\left. \frac{dt}{dz'} \right|_{z'} + \left. \frac{d^2T}{dz'^2} \right|_{z'} dz \right) - \left. \frac{dt}{dz'} \right|_{z'} \right] \\ &= \lambda dz \left. \frac{d^2T}{dz'^2} \right|_{z'} \end{aligned}$$

の熱が流れ込むことになる。一方温度分布がどの点でも V の速度で動くことによって表されるとすると、単位時間後の点 z (固定座標) の温度は

$$T|_z - V \frac{dT}{dz'} \Big|_z$$

である。従って温度変化は

$$-V \frac{dT}{dz'} \Big|_z$$

となる。厚さ $d z'$ で比熱 c の体積素片だから流れ出す熱量は

$$-c V dz', \frac{dT}{dz'} \Big|_z$$

定常状態であるから、流入量と流出量は等しくなければならない。

$$\lambda dz \frac{d^2 T}{dz'^2} = -c V dz' \frac{dT}{dz'}$$

$$\lambda \frac{d^2 T}{dz'^2} + c V \frac{dT}{dz'} = 0$$

$$\frac{d^2 T}{dz'^2} + \frac{V}{\lambda/c} \frac{dT}{dz'} = 0$$

$$\frac{d^2 T}{dz'^2} + \frac{V}{D_{th}} \frac{dT}{dz'^2} = 0$$

(2.2)

(2.1) は今の操作を3次元で行えばよい。

さて、 (ξ, η, θ) 座標で (2.1) を書き換えることにする。(1.23), (1.25) を(2.1)に代入して

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho^2(\xi^2 + \eta^2)} \left[\frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\rho^2 \xi^2 \eta^2} \frac{\partial T}{\partial \theta} \\ + \frac{V}{D_{th}} \frac{1}{\rho(\xi^2 + \eta^2)} \left(\xi \frac{\partial T}{\partial \xi} - \eta \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) = 0 \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) + \frac{\xi^2 + \eta^2}{\xi^2 \eta^2} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{\rho V}{D_{th}} \left(\xi \frac{\partial T}{\partial \xi} - \eta \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) = 0$$

ここで $\partial T / \partial \theta$ [軸対称] を仮定する。(この仮定は自明ではない。)

$$\frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) + \frac{\rho V}{D_{th}} \left(\xi \frac{\partial T}{\partial \xi} - \eta \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) = 0$$

$$\frac{1}{\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} + \frac{\partial^2 T}{\partial \eta^2} + \frac{\rho V}{D_{th}} \left(\xi \frac{\partial T}{\partial \xi} - \eta \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) = 0$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + \frac{\rho V}{D_{th}} \xi \right) \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 T}{\partial \eta^2} + \left(\frac{1}{\eta} - \frac{\rho V}{D_{th}} \eta \right) \frac{\partial T}{\partial \eta} = 0$$

$\frac{\rho V}{2D_{th}} = p$ (Peclet数) を使って

$$\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p\xi \right) \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 T}{\partial \eta^2} + \left(\frac{1}{\eta} - 2p\eta \right) \frac{\partial T}{\partial \eta} = 0 \quad (2.3)$$

2.2.2 Иванцовの解の導出

(2.3) 式を支配方程式として、境界条件として以下の仮定をもうける。

- 1) $\xi < 1$ (固相部) で温度は融点に等しい。

$$T = T_M \quad (\text{at } \xi < 1) \quad (2.4)$$

- 2) 界面から無限遠前方で過冷度一定

$$T = T_\infty \quad (\text{at } \xi \rightarrow \infty) \quad (2.5)$$

ただし

$$T_\infty < T_M$$

である。

3) $\xi = \text{const}$ の曲面上で液相温度は一定、即ち、

$$\frac{\partial T}{\partial \eta} = 0 \quad (2.6)$$

まず3) 即ち (2.6) 式より、(2.3) 式は

$$\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p\xi \right) \frac{\partial T}{\partial \eta} = 0$$

となる。液相部分のみを問題にしているのだから、添字: L を付けよう。

$$\frac{\partial^2 T_L}{\partial \xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p_L \xi \right) \frac{\partial T_L}{\partial \xi} = 0 \quad (2.7)$$

ここで T_L は ξ のみの函数であるから、偏微分を常微分に書き換えてよい。

$$\frac{d^2 T_L}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p_L \xi \right) \frac{dT_L}{d\xi} = 0 \quad (2.8)$$

境界条件 (2.4), (2.5) は

$$T_L = T_M \quad \text{at } \xi = 1 \quad (2.9)$$

$$T_L = T_\infty \quad \text{at } \xi \rightarrow \infty \quad (2.10)$$

と書きなおされる。(2.8) 式で $\frac{dT_L}{d\xi} = g(\xi)$ とおいて (2.11)

$$\frac{dg}{d\xi} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p_L \xi \right) g = 0$$

$$\frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial \xi} = -\frac{1}{\xi} - 2p_L \xi$$

積分して

$$\begin{aligned}\log g &= -\log \xi - p_L \xi^2 + C_1 \\ &= C_1 \log \frac{e^{-p_L \xi^2}}{\xi} \\ g &= \frac{dT_L}{d\xi} = C_2 \frac{e^{-p_L \xi^2}}{\xi}\end{aligned}\tag{2.12}$$

$T_L(\xi)$ を求めるには (2.12) を再び積分すればよい。

$$\begin{aligned}T_L &= C_2 \int_{\xi}^{\infty} g(t) dt + C_3 \\ &= C_2 \int_{\xi}^{\infty} \frac{e^{-p_L t^2}}{t} dt + C_3\end{aligned}$$

ここで

$$u = p_L t^2$$

と置換すると

$$dt = \frac{du}{2p_L t} = \frac{2p_L t du}{u}$$

よって

$$\begin{aligned}T_L &= C_2 \int_{p_L \xi^2}^{\infty} \frac{e^{-u}}{t} \frac{2p_L t}{u} du + C_3 \\ &= 2p_L C_2 \int_{p_L \xi^2}^{\infty} \frac{e^{-u}}{u} du + C_3 \\ &= C_4 Ei(-p_L \xi^2) + C_3\end{aligned}\tag{2.13}$$

となる。ただし、 C_1, C_2, C_3, C_4 は任意定数であり、

$$Ei(-x) = -\int_x^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt \quad [x > 0]$$

は積分指数関数である。

境界条件 (2.9), (2.10) より

$$T_M = C_4 Ei(-p_L) + C_3$$

$$T_\infty = C_3$$

であるから

$$T_L = T_\infty + (T_M - T_\infty) \frac{Ei(-p_L \xi^2)}{Ei(-p_L)} \quad (2.14)$$

となる。これは、(1.26) 式と同じものである。Peclet数 : p_L の決定については前に述べた。

2.3 Темкинの仮定

Иванцовの解で(1.13)式でPeclet数 $p_L = V\rho / 2D_{th}$ は一意に定まるが、 V, ρ は個々に定まらない。

Темкин [3] は、以下の仮定を措いて、 V, ρ を個々に導出した。

1) 界面はGibbs-Thomson効果によりいわゆる平衡温度より過冷する。

$$T_K = T_M - 2\sigma T_M / \gamma_1 Q' R \quad (3.1)$$

ここで、

T_K : 曲率半径 R の界面の溶融点

σ : 固液界面エネルギー

γ_1 : 固相の密度

Q' : 単位質量当りの溶融潜熱

ふつうこの式はGibbs-Thomson係数

$$\Gamma = \sigma / \Delta S \gamma = \sigma T / \gamma Q$$

を使って

$$T_K = T_M - 2\Gamma / R \quad (3.2)$$

と書かれている。

2) 結晶の表面での法線方向の成長速度はその点での過冷度に依存する。

第一近似として線形関係を考える。

$$V_n = \mu_0 (T_K - T_I) \quad (3.3)$$

ここで

μ_0 : 比例定数

T_I : 固液界面の現実の温度

である。

1), 2) を総合して

$$T_I = T_M - (2\sigma T_M / \gamma_1 Q' R) - V_n / \mu_0 \quad (3.4)$$

となる。

このもとでは、結晶はИванцовの導いた回転放物体の幾何学を保つことはできないが、第一近似として回転放物体であるかのように扱う。これは界面での局所平衡の式である。

Appendix Aより、点 $(1, \eta, 0)$ での界面の平均曲率は

$$H = \frac{1}{R} = \frac{-(\eta^2 + 2)}{2\rho(1 + \eta^2)^{3/2}}$$

であって、同じく

$$\mathbf{e} = \frac{1}{2\rho(1 + \eta^2)^{1/2}} (\eta \cos \theta, \eta \sin \theta, 1)$$

$$\mathbf{V} = (0, 0, V)$$

であるから、

$$V_n = \frac{1}{\sqrt{1 + \eta^2}} (0, 0, V)$$

となる。

従って、(3.4) 式は

$$T_I = T_M - \frac{\delta T_M (\eta^2 + 2)}{\gamma_1 Q' \rho (1 + \eta^2)^{3/2}} - \frac{V}{\mu_0 \sqrt{1 + \eta^2}} \quad (3.5)$$

と書かれる。

ここで

$$U_s(\xi, \eta) = T_s(\xi, \eta) - T_M \quad (3.6)$$

$$U_L(\xi, \eta) = T_L(\xi, \eta) - T_L(\xi) \quad (3.7)$$

ただし

$$T'_L(\xi) = T_\infty + (T_M - T_\infty) \frac{Ei(-p_L \xi^2)}{Ei(-p_L)}$$

はИванцовの等温解であるが、上記のように $U_{L,s}(\xi, \eta)$ を定めると、支配方程式は

$$\frac{\partial^2 U_i}{\partial \xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p_i \xi \right) \frac{\partial U_i}{\partial \xi} + \left(\frac{1}{\eta} - 2p_i \eta \right) \frac{\partial U_i}{\partial \eta} = 0$$

(i = L, S) (3.8)

境界条件は

$$U_i(1, \eta) = -\frac{\sigma T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \frac{\eta^2 + 2}{(1 + \eta^2)^{3/2}} - \frac{V}{\mu_0} \frac{1}{\sqrt{1 + \eta^2}}$$

(3.9)

[界面上]

$$U_S(\xi, \infty) = 0 \quad \text{[固相無限後方]} \quad (3.10)$$

$$U_L(\infty, \eta) = 0 \quad \text{[液相無限前方]} \quad (3.11)$$

である。

彼はこの解をベッセル函数で近似し、温度場を記述すると共に先端曲率半径 ρ_0 、成長速度 V_{max} を個々に記述することに成功した。

$$\left(2 + \frac{\mathcal{L}_1}{\mu_0 \rho_0} \right)^n = \frac{2\alpha}{(\gamma_1 \gamma_2)(2\eta - 1)\mathcal{L}_2 \delta} \left[\frac{2n-1}{n} \frac{(T_M - T_\infty)c_2}{Q'} \right]^n$$

$$\times \left[\rho_0 - (n-1) \frac{\mathcal{L}_1}{\mu_0} \right]$$

$$V_{max} = \frac{(2n-1)\mathcal{L}_2 \delta}{\rho_0 \left[\rho_0 - (n-1) \frac{\mathcal{L}_1}{\mu_0} \right]}$$

ここで、

$$n = 1.21$$

$$\alpha = 0.457$$

$$\mathcal{L}_1 = \lambda_2 [n_1 + \lambda_1 m_1 / \lambda_2] / \gamma_1$$

$$\mathcal{L}_2 = [\lambda_2 T_M / (\gamma_1 Q')^2] (n_2 + \lambda_1 m_2 / \lambda_2)$$

$$m_1 \approx 0.60, \quad m_2 \approx 2.08$$

$$n_1 \approx 1.33, \quad n_2 \approx 3.86$$

であり、 γ_i, c_i, λ_i の添字の 1, 2 は 1 が固相 (=S)、2 が液相 (=L) をあらわす。

2.4 Trivediの解

Темкинの問題設定 (3.8) ~ (3.11) は Trivedi によって解析的に解かれた。この解の導出を検討し、本章のまとめを行いたい。

まず、(3.8) 式を

$$U_i(\xi, \eta) = F_i(\xi) G_i(\eta) \quad (4.1)$$

とおいて変数分離する。代入して

$$\begin{aligned} G(\eta) \frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p_i \xi \right) G(\eta) \frac{dF(\xi)}{d\xi} \\ + F(\xi) \frac{d^2 G(\eta)}{d\eta^2} + \left(\frac{1}{\eta} - 2p_i \eta \right) F(\xi) \frac{dG(\eta)}{d\eta} = 0 \\ G(\eta) \left\{ \frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p_i \xi \right) \frac{dF(\xi)}{d\xi} \right\} = -F(\xi) \left\{ \frac{d^2 G(\eta)}{d\eta^2} + \left(\frac{1}{\eta} - 2p_i \eta \right) \frac{dG(\eta)}{d\eta} \right\} \\ \frac{1}{F(\xi)} \left\{ \frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p_i \xi \right) \frac{dF(\xi)}{d\xi} \right\} = -\frac{1}{G(\eta)} \left\{ \frac{d^2 G(\eta)}{d\eta^2} + \left(\frac{1}{\eta} - 2p_i \eta \right) \frac{dG(\eta)}{d\eta} \right\} = \nu \end{aligned}$$

従って

$$\frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{\xi} + 2p_i \xi \right) \frac{dF}{d\xi} - \nu F = 0 \quad (4.2)$$

と

$$\frac{d^2 G}{d\eta^2} + \left(\frac{1}{\eta} - 2p_i \eta \right) \frac{dG}{d\eta} + \nu G = 0 \quad (4.3)$$

に変数分離された。

はじめに $G(\eta)$ を求める。これは $G(\eta)$ が連続関数であることが期待されるからである。

$$x = p_i \eta^2 \quad (4.4)$$

と置換して

$$\begin{aligned}\frac{dG}{d\eta} &= \frac{dG}{dx} \frac{dx}{d\eta} = 2p_i \eta \frac{dG}{dx} \\ \frac{d^2G}{d\eta^2} &= \frac{d}{d\eta} \left(\frac{dG}{d\eta} \right) = 2p_i \frac{dG}{dx} + 2p_i \eta \frac{d}{d\eta} \left(\frac{dG}{dx} \right) \\ &= 2p_i \frac{dG}{dx} + 2p_i \eta \frac{d^2G}{dx^2} \frac{dx}{d\eta} = 2p_i \frac{dG}{dx} + 4p_i^2 \eta^2 \frac{d^2G}{dx^2}\end{aligned}$$

を(4.3)式に代入する。 x に関する2階の微分方程式として

$$\begin{aligned}\left(2p_i \frac{dG}{dx} + 4p_i^2 \eta^2 \frac{d^2G}{dx^2} \right) + \left(\frac{1}{\eta} - 2p_i \eta \right) \left(2p_i \eta \frac{dG}{dx} \right) + \nu G &= 0 \\ 4p_i^2 \eta^2 \frac{d^2G}{dx^2} + 2p_i \frac{dG}{dx} + 2p_i \frac{dG}{dx} - 4p_i^2 \eta^2 \frac{dG}{dx} + \nu G &= 0 \\ 4p_i x \frac{d^2G}{dx^2} + (4p_i - 4p_i x) \frac{dG}{dx} + \nu G &= 0 \\ x \frac{d^2G}{dx^2} + (1-x) \frac{dG}{dx} + \frac{\nu}{4p_i} G &= 0\end{aligned}\tag{4.5}$$

を得る。境界条件としては、

$$\begin{aligned}x \rightarrow 0 \text{ なるとき} \\ G(x) \text{ が有界}\end{aligned}\tag{4.6}$$

$$\begin{aligned}x \rightarrow \infty \text{ なるとき} \\ G(x) = 0 \quad (x^k)\end{aligned}\tag{4.7}$$

(4.5)~(4.7) であらわされる特異境界値問題の解として

$$\begin{aligned}\frac{\nu}{4p_i} = 0, 1, 2, \dots \text{で} \\ L_n^{\circ}(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) = n! \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \binom{n}{k} x^{ik}\end{aligned}\tag{4.8}$$

となる固有値、固有函数が得られる。

従って、

$$G(\eta) \sim L_n^{\circ} \quad (p_i \eta^2)$$

となる。([7], p. 289左上)

なお、ラゲール多項式が (4.5) ~ (4.7) の問題の固有函数であること、

$$\int_0^{\infty} e^{-x} L_n(x) L_m(x) dx = 0 \quad (n \neq m)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-x} (L_n(x))^2 dx = (n!)^2$$

という直交関係が成立していること、完全 (complete) であることは、文献 [8] に詳しい。

$F(\xi)$ の方は、

$$y = -p_i \xi^2 \quad (4.9)$$

と置換して、(4.2) を書き換えて、

$$y \frac{d^2 F}{dy^2} + (1-y) \frac{dF}{dy} + \frac{\nu}{4p_i} F = 0 \quad (4.10)$$

ここで、 $\nu / 4 p_i = n$ は $G(\eta)$ の方から定まっている。この合流型超幾何方程式の解は

$$\Phi(-n, 1, x)$$

と

$$\Psi(-n, 1, x)$$

である。 $\Psi(-n, 1, x)$ の代わりに $e^x \Psi(n+1, 1, -x)$ と書いてよい。(Appendix Bを見よ。)

以上より

$$U_L(\xi, \eta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_L \frac{e^{-p_L \xi^2} \Psi(n+1, 1, p_L \xi^2)}{e^{-p_L} \Psi(n+1, 1, p_L)} L_n^{\circ}(p_L \eta^2) \quad (\xi \geq 1) \quad (4.11)$$

$$U_S(\xi, \eta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_S \frac{\Phi(-n, 1, p_S \xi^2)}{\Phi(-n, 1, p_S)} L_n^{\circ}(p_S \eta^2) \quad (\xi \leq 1) \quad (4.12)$$

と解の形が決った。式の右辺の分母は、 $A_L(p_L) = A_S(p_S)$ を満たすように付けられた。($\xi = 1$ で両式とも境解条件は (3.9) である。)

次に A_i を求める。境界条件より

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_i(n) L_n^0(p_i \eta^2) = -\frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \frac{\eta^2 + 2}{(1 + \eta^2)^{3/2}} - \frac{V}{\mu_0} \frac{1}{\sqrt{1 + \eta^2}} \quad (4.13)$$

さらに

$$x = p_i \eta^2 \quad (4.4)$$

であるから、

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_i(n) L_n^0(x) = -\frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \frac{(2p_i + x)\sqrt{p_i}}{(p_i + x)^{3/2}} - \frac{V}{\mu_0} \frac{\sqrt{p_i}}{(p_i + x)^{1/2}} = f(x) \quad (4.14)$$

で

$$\begin{aligned} A_i(n) &= \int_0^{\infty} e^{-x} f(x) L_n^0(x) dx \\ &= -\frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \int_0^{\infty} \frac{(2p_i + x)\sqrt{p_i}}{(p_i + x)^{3/2}} e^{-x} L_n^0(x) dx - \frac{V}{\mu_0} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{p_i}}{(p_i + x)^{1/2}} e^{-x} L_n^0(x) dx \\ &= -\left(\frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} + \frac{V}{\mu_0} \right) \int_0^{\infty} \left(\frac{p_i}{p_i + x} \right)^{1/2} e^{-x} L_n^0(x) dx \\ &\quad - \frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \int_0^{\infty} \left(\frac{p_i}{p_i + x} \right)^{3/2} e^{-x} L_n^0(x) dx \\ &= -\left(\frac{V}{\mu_0} + \frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \right) \sqrt{p_i} I_1 - \frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \rho^{3/2} I_2 \end{aligned} \quad (4.15)$$

となる。 I_1, I_2 はラゲールの多項式の積分表示 ([7], [8]) を使って求められ、

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^{\infty} \frac{1}{(p_i + x)^{1/2}} \int_0^{\infty} \frac{1}{n!} t^n J_0(2\sqrt{xt}) e^{-t} dt \cdot dx \\ &= \int_0^{\infty} \frac{t^n e^{-t}}{n!} \int_0^{\infty} \frac{J_0(\sqrt{xt})}{(p_i + x)^{1/2}} dx dt \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_0^{\infty} \frac{1}{(p_i + x)^{3/2}} \int_0^{\infty} \frac{1}{n!} t^n J_0(2\sqrt{xt}) e^{-t} dt \cdot dx \\ &= \int_0^{\infty} \frac{t^n e^{-t}}{n!} \int_0^{\infty} \frac{J_0(2\sqrt{xt})}{(p_i + x)^{3/2}} dx dt \end{aligned} \quad (4.16b)$$

ここで

$$\sqrt{x} = X, \quad dx = 2X dX$$

とおくと、 I_1 では

$$\int_0^\infty \frac{J_0(2\sqrt{xt})}{(p_i+x)^{\nu/2}} dx = \int_0^\infty \frac{2XJ_0(2X\sqrt{t})}{(p_i+X^2)^{\nu/2}} dX$$

となり、公式 ([9], p.196)

$$\int_0^\infty x^{\nu+1}(x^2+y^2)^{-\mu-1} J_\nu(ax) = \frac{a^\mu y^{\nu-\mu} K_{\nu-\mu}(ay)}{2\mu \Gamma(\mu+1)}$$

$$[2\operatorname{Re} \mu + (3/2) > \operatorname{Re} \nu > -1]$$

が適用できる。 I_2 の場合も同様である。

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{J_0(2\sqrt{xt})}{(p_i+x)^{\nu/2}} dx &= 2 \frac{(2\sqrt{t})^{-\frac{1}{2}} (\sqrt{p_i})^{\nu/2} K_{\frac{1}{2}}(2\sqrt{tp_i})}{2^{-\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} \\ &= 2 \sqrt{\frac{p_i}{t}} \frac{K_{\frac{1}{2}}(2\sqrt{tp_i})}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} \\ &= 2 \sqrt{\frac{\rho}{t}} \frac{\sqrt{\pi/(4\sqrt{tp_i})}}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} e^{-2\sqrt{tp_i}} \\ &= \frac{e^{-2\sqrt{tp_i}}}{\sqrt{t}} \end{aligned}$$

(4.17a)

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \frac{J_0(2\sqrt{xt})}{(p_i+x)^{3/2}} dx &= 2 \frac{(2\sqrt{t})^{\frac{1}{2}} (\sqrt{p_i})^{\frac{1}{2}} K_{-\frac{1}{2}}(2\sqrt{tp_i})}{2^{\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \\
&= 2 \sqrt{\frac{t}{p_i}} \frac{K_{-\frac{1}{2}}(2\sqrt{tp_i})}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \\
&= 2 \sqrt{\frac{t}{p_i}} \frac{\sqrt{\pi(4\sqrt{tp_i})}}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} e^{-2\sqrt{tp_i}} \\
&= \frac{2e^{-2\sqrt{tp_i}}}{\sqrt{p_i}}
\end{aligned} \tag{4.17b}$$

ここで、 I_1 、 I_2 の表し方は2通りある。ひとつは、(4.17a) (4.17b) をそのまま使って、

$$I_1 = \int_0^\infty \frac{t^n e^{-t} e^{-2\sqrt{tp_i}}}{n! \sqrt{t}} dt = e^{p_i} \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} I_{2n} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_i}) \tag{4.18a}$$

$$I_2 = \int_0^\infty \frac{2t^n e^{-t} e^{-2\sqrt{tp_i}}}{n! \sqrt{p_i}} dt = -2 \frac{\partial I_1}{\partial p_i} = \frac{2e^{p_i}}{\sqrt{p_i}} I_{2n+1} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_i}) \tag{4.18b}$$

とするものである。ここで、

$$I_{2n} \operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)} \int_0^\infty e^{-(t+x)^2} t^{2n} dt \tag{4.19}$$

は、normalized integral error function ([10] および、Appendix C) である。従って、

$$A_{i(n)} = -\frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \left[2p_i I_{2n+1} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_i}) + \sqrt{p_i} \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} I_{2n} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_i}) \right]$$

$$-\frac{V}{\mu_0} e^{p_i} \sqrt{p_i} \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} I_{2n} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_i})$$

(i = S, L) (4.20)

となる。(4.20) と (4.11), (4.12) で $U_L(\xi, \eta)$, $U_S(\xi, \eta)$ は記述され、

$$T_L(\xi, n) = U_L(\xi, n) + T_\infty + (T_M - T_\infty) \frac{\operatorname{Ei}(-p_L \xi^2)}{\operatorname{Ei}(-p_L)}$$

$$T_S(\xi, n) = U_S(\xi, n) + T_M$$

であったことを思いおこせば、Peclet数さえ決まれば温度場は記述されることになる。(4.20)は別の表わし方があって、公式([7], p. 278および Appendix D)

$$\Psi(\alpha, \gamma; z) = \frac{2z^{(1-\gamma)/2}}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\alpha-\gamma+1)} \int_0^\infty e^{-t} t^{\alpha-\frac{1}{2}(1+\gamma)} K_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) dt$$

(4.21)

を使うと

$$A_i(n) = -\left(\frac{V}{\mu_0} + \frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \sqrt{p_i} \int_0^\infty \frac{2t^n e^{-t}}{n!} \sqrt{\frac{p_i}{t}} \frac{K_{\frac{1}{2}}(2\sqrt{tp_i})}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} dt\right.$$

$$\left. - \frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} p_i^{3/2} \int_0^\infty \frac{2e^{-t} t^n}{n!} \sqrt{\frac{t}{p_i}} \frac{K_{\frac{3}{2}}(2\sqrt{tp_i})}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} dt\right)$$

$$= -\left(\frac{V}{\mu_0} + \frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho}\right) \frac{p_i \Gamma\left(n+1 - \frac{3}{2} + 1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} \Psi\left(n+1, \frac{3}{2}; p_i\right)$$

$$- \frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \frac{p_i \Gamma\left(n+1 - \frac{1}{2} + 1\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \Psi\left(n+1, \frac{1}{2}; p_i\right)$$

$$\begin{aligned}
&= -\left(\frac{V}{\mu_0} + \frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho}\right) \frac{p_i \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\sqrt{\pi}} \Psi\left(n+1, \frac{3}{2}; p_i\right) \\
&\quad - \frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \frac{2p_i \Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right)}{\sqrt{\pi}} \Psi\left(n+1, \frac{1}{2}; p_i\right)
\end{aligned} \tag{4.22}$$

となる。

さて、Peclet 数 (p_L , p_s) および、成長速度: V , 結晶の先端曲率 ρ を求めよう。(1.27) 式にならって、

$$\begin{aligned}
\frac{V_n}{V \cos \phi} \frac{2p_L Q}{c_L} &= -\frac{\partial T_L}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} + \frac{\lambda_s}{\lambda_L} \frac{\partial T_s}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} \\
&= \frac{2(T_M - T_\infty)}{e^{p_L} Ei(p_L)} - \frac{\partial U_L}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} + \frac{\lambda_s}{\lambda_L} \frac{\partial U_s}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1}
\end{aligned} \tag{4.23}$$

と界面における熱収支を考える。(4.23) 式の左辺は

$$\frac{V_n}{V \cos \phi} \frac{V \rho Q}{D_{ih}^L c_L} = \frac{V_n}{\cos \phi} \frac{Q}{\lambda_L} \rho$$

である。余分な係数: ρ がつくのは、微分を $\partial T / \partial z'$ でなく、 $\partial T / \partial \xi$ で行うためである。

$\partial U_i / \partial \xi$ を考えるために、次の微分の式が有用である ([7], p.261, 265)。

$$\frac{d}{dz} \Phi(\alpha, \gamma; z) = \frac{\alpha}{\gamma} \Phi(\alpha+1, \gamma+1; z) \tag{4.24 a}$$

$$\frac{d^m}{dz^m} \Phi(\alpha, \gamma; z) = \frac{(\alpha)_m}{(\gamma)_m} \Phi(\alpha+m, \gamma+m; z) \tag{4.24 b}$$

$m=1, 2, \dots$

$$\frac{d}{dz} \Psi(\alpha, \gamma; z) = -\alpha \Psi(\alpha+1, \gamma+1; z) \tag{4.24 c}$$

$$\frac{d^m}{dz^m} \Psi(\alpha, \gamma; z) = (-1)^m (\alpha)_m \Psi(\alpha + m, \gamma + m; z) \quad m=1, 2, \dots \quad (4.24d)$$

また、次の漸化式を使う。

$$\Psi - \alpha \Psi(\alpha + 1) - \Psi(\gamma + 1) = 0 \quad (4.25)$$

(4.11) と (4.20), (4.12) と (4.20) を (4.23) に代入して、

$$\begin{aligned} & 2 \left[\frac{V_n}{V \cos \phi} p_L \frac{Q}{c_L} - \frac{T_M - T_\infty}{e^{p_L} \text{Ei}(p_L)} \right] \\ &= -\frac{\delta T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \left[\hat{N}_2(p_L, \eta) + \frac{\lambda_s}{\lambda_L} \hat{M}_2(p_s, \eta) \right] \\ & \quad - \frac{V}{\mu_0} \left[\hat{N}_1(p_L, \eta) + \frac{\lambda_s}{\lambda_L} \hat{M}_1(p_s, \eta) \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

となる。 $\hat{N}_1, \hat{N}_2, \hat{M}_1, \hat{M}_2$ は以下のようにして求める。

$$\begin{aligned} \hat{N}_1 &= -e^{p_L} \sqrt{p_L} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} I_{2n} \text{erfc}(\sqrt{p_L}) \frac{\frac{d}{d\xi} \left[e^{-p_L \xi^2} \Psi(n+1, 1, p_L \xi^2) \right]_{\xi=1}}{e^{-p_L} \Psi(n+1, 1; p_L)} L_n^0(p_L \eta^2) \\ &= -e^{p_L} \sqrt{p_L} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} I_{2n} \text{erfc}(\sqrt{p_L}) L_n^0(p_L \xi^2) \\ & \quad \times \frac{[e^{-p_L \xi^2} (-2p_L \xi) \Psi(n+1, 1, p_L \xi^2) - e^{-p_L \xi^2} (-n+1) \Psi(n+2, 2, p_L \xi^2) (2p_L \xi)]_{\xi=1}}{e^{-p_L} \Psi(n+1, 1, p_L)} \\ &= -e^{p_L} \sqrt{p_L} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} I_{2n} \text{erfc}(\sqrt{p_L}) \\ & \quad \times \frac{-2e^{-p_L} p_L [\Psi(n+1, 1, p_L) + (n+1) \Psi(n+2, 2, p_L)]}{e^{-p_L} \Psi(n+1, 1, p_L)} L_n^0(p_L \eta^2) \end{aligned}$$

$$= 2p_L^{3/2} e^{p_L} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} I_{2n} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_L}) \frac{\Psi(n+1, 2, p_L)}{\Psi(n+1, 1, p_L)} L_n^{\circ}(p_L \eta^2) \quad (4.27a)$$

同様にして、

$$\begin{aligned} \hat{N}_2 = 2p_L^{3/2} e^{p_L} \sum_{n=0}^{\infty} & \left[2\sqrt{p_L} I_{2n+1} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_L}) + \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} I_{2n} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_L}) \right] \\ & \times \frac{\Psi(n+1, 2, p_L)}{\Psi(n+1, 1, p_L)} L_n^{\circ}(p_L \eta^2) \end{aligned} \quad (4.27b)$$

$$\hat{M}_1 = 2p_s^{3/2} e^{p_s} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n)} I_{2n} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_s}) \frac{\Phi(-n+1, 2, -p_s)}{\Phi(-n, 1, -p_s)} L_n^{\circ}(p_L \eta^2) \quad (4.27c)$$

$$\begin{aligned} \hat{M}_2 = 2p_s^{3/2} e^{p_s} \sum_{n=0}^{\infty} & \left[2\sqrt{p_s} I_{2n+1} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_s}) + \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n)} I_{2n} \operatorname{erfc}(\sqrt{p_s}) \right] \\ & \times \frac{\Phi(-n+1, 2, -p_s)}{\Phi(-n, 1, -p_s)} L_n^{\circ}(p_L \eta^2) \end{aligned} \quad (4.27d)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \hat{N}_1(p_L, \eta) + \frac{\lambda_s}{\lambda_L} \hat{M}_1(p_s, \eta) &= \hat{S}_1 \\ \hat{N}_2(p_L, \eta) + \frac{\lambda_s}{\lambda_L} \hat{M}_2(p_s, \eta) &= \hat{S}_2 \end{aligned}$$

とにおいて、(4.26) 式を整理し直す。

$$\begin{aligned} 2 \left[\frac{V_n}{V \cos \phi} p_L \frac{Q}{c_L} - \frac{T_M - T_{\infty}}{e^{p_L} \operatorname{Ei}(p_L)} \right] &= -\frac{\sigma T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \hat{S}_2 - \frac{V}{\mu_0} \hat{S}_1 \\ \frac{T_M - T_{00}}{p_L e^{p_L} \operatorname{Ei}(p_L)} \frac{c_L}{Q} &= \frac{\lambda_L}{2p_L Q} \left(\frac{\sigma T_M}{\gamma_1 Q' \rho} \hat{S}_2 + \frac{V}{\mu_0} \hat{S}_1 \right) + \frac{V_n}{V \cos \phi} \end{aligned}$$

従って、

$$\hat{L}_1(p, \eta) = \frac{\lambda_L}{Q} \hat{S}_1 = \frac{\lambda_L}{Q} \left[\hat{N}_1(p_L, \eta) + \frac{\lambda_s}{\lambda_L} \hat{M}_1(p_s, \eta) \right] \quad (4.28 a)$$

$$\hat{L}_2(p, \eta) = \frac{\lambda_L T_M}{Q \gamma_1 Q'} \hat{S}_2 = \frac{\lambda_L T_M}{Q \gamma_1 Q'} \left[\hat{N}_2(p_L, \eta) + \frac{\lambda_s}{\lambda_L} \hat{M}_2(p_s, \eta) \right] \quad (4.29 b)$$

とおくと、(4.26) 式は、

$$(T_M - T_\infty) \frac{c_L}{Q} = p_L e^{p_L} Ei(p_L) \left[\frac{V_n}{V \cos \rho} + \frac{\sigma}{V \rho^2} \hat{L}_2(p, \eta) + \frac{1}{\mu_o \rho} \hat{L}_1(p, \eta) \right] \quad (4.30)$$

界面全体でなく、 $\eta = 0$ (結晶=回転放物体の先端) で考えて

$$(T_M - T_\infty) \frac{c_L}{Q} = p_L e^{p_L} Ei(p_L) \left[1 + \frac{\sigma}{V \rho^2} \hat{L}_2(p) + \frac{1}{\mu_o \rho} \hat{L}_1(p) \right] \quad (4.31)$$

を得る。ところで、(4.31) 式は V , ρ と液体・個体の Peclet 数 p_L , p_s の 4 つの独立変数の式のように見えるが、((4.28) 式を参照)

$$p_L = V \rho / 2D_{th}^L$$

$$p_s = V \rho / 2D_{th}^S$$

であるから、結局 V , ρ の 2 つの未知数よりなる方程式が熱収支の式より導かれたことになる。これでは V , ρ を個々に決定するには条件が不足するので

$$\frac{\partial V}{\partial \rho} = 0 \quad (4.32)$$

として、最大の成長速度で結晶が成長することを仮定する。(4.32) を (4.31) に適用して

$$(T_M - T_\infty) \frac{c_L}{Q} \frac{[1 - p_L e^{p_L} Ei(p_L)]}{p_L e^{p_L} Ei(p_L)}$$

$$\begin{aligned}
&= p_L e^{p_L} Ei(p_L) \left[\frac{\sigma}{V \rho^2} \hat{L}'_2(p) + \frac{1}{\mu_0 \rho} \hat{L}'_1(p) \right] \\
&\quad + e^{p_L} Ei(p_L) \left[1 - \frac{\sigma}{V \rho^2} \hat{L}_2(p) \right]
\end{aligned}
\tag{4.33}$$

を得る。プライムは ρ に関する微分であることを示している。

V, ρ は、(4.31) と (4.33) を連立して数値計算で具体的な値を求めることができる。

3 最大成長速度の仮定と摂動論

3.1 最大成長速度の仮定と実験結果

第2章で紹介したИванцов, Темкин, Trivediらの解は実験結果をうまく説明するものであろうか。Fig. 5にLanger and Muller-Krumhhaar [11] の論文にある比較を示した。

Иванцовの解はPeclet数=一定の直線であり、 V, ρ は定まらない。Темкин, Trivediらの結果はPeclet数=一定は曲線となり成長速度 V は最大値を持つが、その極値条件の点（黒丸で示す）は成長速度・結晶先端曲率半径とも無次元数で1オーダー以上実験結果と食い違っている。ここでPeclet数は実験結果とかなりよい一致を示していることに注意する。問題は最大成長速度の仮定（Trivediの例では本Reviewで(4.32)式）を導入することにより生じたと考える。従って、「最大成長速度の仮定」を次節で検討したい。

なお、Fig. 5 中の d_0 は毛管長さ (capilarity length) であり、

$$d_0 = \frac{c_L T_M \sigma}{Q^2} \quad (1.1)$$

で定義され、 Δ は無次元過冷度であり、

$$\Delta = \frac{(T_M - T_{\infty}) c_L}{Q} \quad (1.2)$$

で定義される。

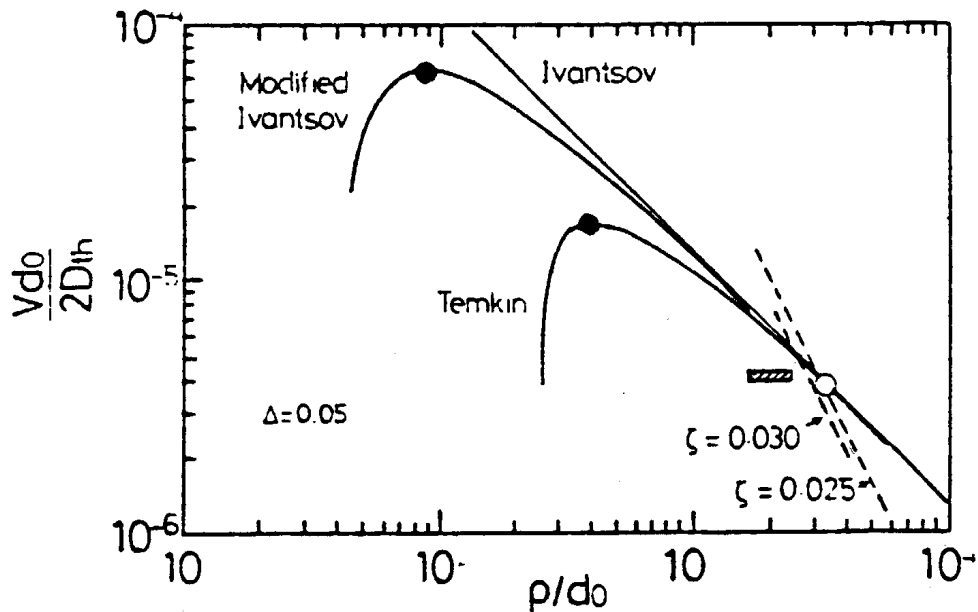


Fig. 5 Growth velocity as a function of tip radius for reduced undercooling $\Delta=0.05$, determined by the three steady-state approximations. The experimental point is the shared rectangle; and the stability criterion predicts the point marked by an open circle. (from Ref. 11)

Ivantsov ——— И в а н ц о в [1]

Temkin ——— Т е м к и н [3]

Modified Ivantsov ——— S e k a r k a e t a l. [14]

3.2 エントロピー生成最小原理から考える

非平衡熱力学によると、系内の各点で局所平衡（凝固の場合、界面での局所平衡が特に問題となる）が成り立ち、現象論的關係式が線形關係を満たすならば、かつ現象論的係数がオンサーガーの關係を満たす定数ならば、与えられた条件（拘束）のもとで定常状態はエントロピー生成最小と等価である。（[12] および [13] p. 32~33）この立場からは、 V, ρ は Peclet 数で結びつけられているから、系のエントロピー生成を V の函数として記述して、

$$\frac{d\sigma[S]}{dV} = 0$$

(2.1)⁺

注.) +エントロピー生成には、(界面エネルギーの符号とまぎらわしいが)慣用に従い、 $\sigma[S]$ を当てた。

を判断基準にして V を（そして ρ を）決定すればよいことになる。また、後に述べる界面安定性の判断基準に対しても熱力学的安定条件と動力学的安定条件は十分条件という意味で等価であることを示せる（[13]p. 67, 68）から、矛盾は生じない。

ところが、一般に、熱力学関数を状態パラメーターの関数として記述することは困難である。そのため、(2.1)を判断基準として成長速度を決定することは難しいが、 V が最大であるならば、エントロピー生成最小〔極小〕が満たされているかどうかを、Темкин, Trivediらの解を簡略化して考えてみよう。界面の局所平衡から、結晶先端で、

$$T_i = T_M - \frac{2\sigma T_M}{\gamma_1 Q' \rho} - \frac{V}{\mu_0} \quad (2.2)$$

である。 ρ, V は

$$\frac{2V\rho}{D_{th}} = p_L \quad (2.3)$$

で結びつけられているから、 V が最大であれば ρ は最小となり、界面温度 T_i は最小（界面での過冷度最大）となる。今、 $T'_i > T_i$ である界面温度が（別の V, ρ の値に対応して）存在したとし、それぞれに対応する（ z 軸に沿った）温度プロフィールを考えてみる。Fig. 6にそれを示すが、界面温度 T_i に対応して実線で温度プロフィールを示し、界面温度 T'_i に対応して破線で温度温度プロフィールを示した。実線の温度プロフィールに対応するエントロピー生成が破線の温度プロフィールに対応するエントロピー生成より小さいことが常に示せればよい。

エントロピー生成は（[13] p. 16, (2.21) 式）

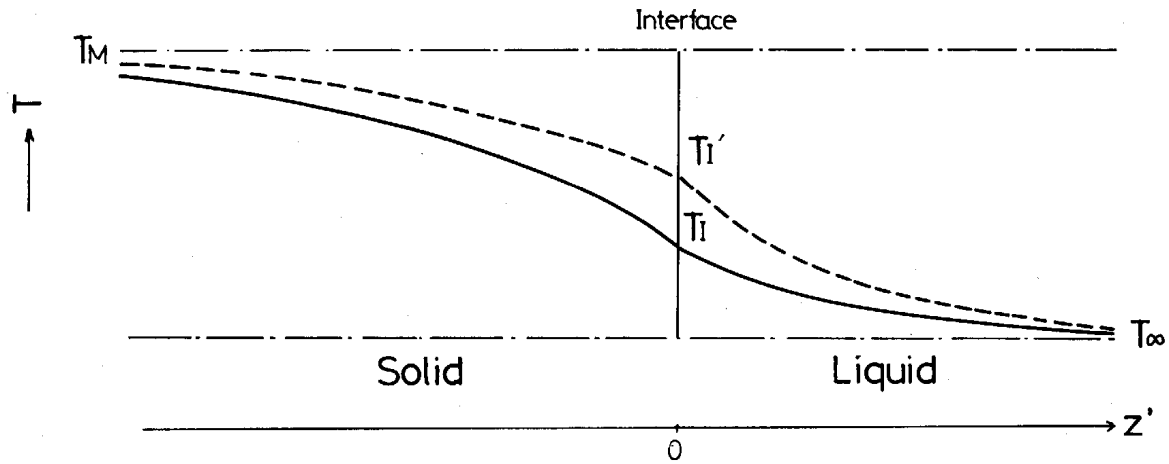


Fig. 6 Schematic illustration of temperature profile

$$\begin{aligned} \sigma[S] = & W_i T^{-1},_i - \sum_{\gamma} (\rho_{\gamma} \Delta \gamma_j) [(\mu_{\gamma} T^{-1}),_j - T^{-1} F_{\gamma j}] \\ & - P_{i,j} T^{-1} V_{i,j} + \sum_{\rho} \omega_{\rho} A_{\rho} T^{-1} \geq 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

と書きあらわされる。今は液相・固相部分について熱流の寄与のみを考える。そうすると、

$$\sigma[S] = W_j T^{-1},_j \quad (2.5)$$

であり、

$$W_j = -\lambda T_{,j} \quad (2.6)$$

である（フーリエの法則）から

$$\begin{aligned} \sigma[S] &= -\lambda T_{,j} T^{-1},_j \\ &= -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial z'} \right) \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{T} \right) \\ &= -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial z'} \right) \frac{-1}{T^2} \left(\frac{\partial T}{\partial z'} \right) \\ &= \lambda \left(\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z'} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.7)$$

となる。

最初に液相部分について考えよう。実線の温度プロファイル（界面温度 T_1 ）のnotationをAで、破線の温度プロファイル（界面温度 T'_1 ）のnotationをBで与えることにする。ここで、

$$T_L^A = (T_1 - T_\infty)e^{-\frac{z'}{l}} + T_\infty \quad (2.8a)$$

$$T_L^B = (T'_1 - T_\infty)e^{-\frac{z'}{l}} + T_\infty \quad (2.8b)$$

と近似できたとする。そうすれば

$$\left| \frac{\partial T_L^A}{\partial z'} \right| = \frac{1}{l} (T_1 - T_\infty) e^{-\frac{z'}{l}} \quad (2.9a)$$

$$\left| \frac{\partial T_L^B}{\partial z'} \right| = \frac{1}{l} (T'_1 - T_\infty) e^{-\frac{z'}{l}} \quad (2.9b)$$

これを

$$\left| \frac{\partial T_L^A}{\partial z'} \right| = (T_1 - T_\infty) \alpha \quad (2.10a)$$

$$\left| \frac{\partial T_L^B}{\partial z'} \right| = (T'_1 - T_\infty) \alpha \quad (2.10b)$$

と略記する。同様に

$$T_L^A = (T_1 - T_\infty) \beta + T_\infty \quad (2.11a)$$

$$T_L^B = (T_1' - T_\infty)\beta + T_\infty \quad (0 < \beta \leq 1) \quad (2.11b)$$

と略記する。

$$A = \left| \frac{1}{T_L^A} \cdot \frac{\partial T_L^A}{\partial Z'} \right| = \frac{(T_1 - T_\infty)\alpha}{T_\infty + (T_1 - T_\infty)\beta} \quad (2.12a)$$

$$B = \left| \frac{1}{T_L^B} \cdot \frac{\partial T_L^B}{\partial Z'} \right| = \frac{(T_1' - T_\infty)\alpha}{T_\infty + (T_1' - T_\infty)\beta} \quad (2.12b)$$

とにおいて、A, Bの大小を比較する。

$$\begin{aligned} \frac{1}{A} - \frac{1}{B} &= \frac{T_\infty + (T_1 - T_\infty)\beta}{(T_1 - T_\infty)\alpha} - \frac{T_\infty + (T_1' - T_\infty)\beta}{(T_1' - T_\infty)\alpha} \\ &= \frac{(T_1' - T_\infty)\{T_\infty + (T_1 - T_\infty)\beta\} - (T_1 - T_\infty)\{T_\infty + (T_1' - T_\infty)\beta\}}{\alpha(T_1 - T_\infty)(T_1' - T_\infty)} \end{aligned}$$

分母 > 0

$$\begin{aligned} \text{分子} &= T_\infty T_1' - T_\infty^2 + \beta(T_1' - T_\infty)(T_1 - T_\infty) \\ &\quad - T_\infty T_1 + T_\infty^2 - \beta(T_1 - T_\infty)(T_1' - T_\infty) \\ &= T_\infty(T_1' - T_1) \end{aligned}$$

ところで $T_1' > T_1$ だから

分子 > 0

$$\therefore \frac{1}{A} > \frac{1}{B}$$

$$B > A$$

(2.13)

ここで (2.7) 式にもどると、液相では

$$\sigma[S]_A < \sigma[S]_B \quad (2.14)$$

あるいは表記を変えて、

$$\sigma[S]_{T_I} < \sigma[S]_{T_I'} \quad (2.15)$$

が示せた。このように、液相部分では、(2.10 a) ~ (2.12 b) の仮定が成り立っているとして、局所的にも大域的にもエントロピー生成最小を満たしている。

固相部分について考えてみよう。温度分布を

$$T_S^A = (T_I - T_M)e^{\frac{z}{l'}} + T_M \quad (2.16a)$$

$$T_S^B = (T_I' - T_M)e^{\frac{z'}{l'}} + T_M \quad (2.16b)$$

と近似して、液相についてと同様に

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial T_S^A}{\partial z'} \right| &= \frac{1}{l'} (T_I - T_M) e^{\frac{z}{l'}} \\ &= (T_M - T_I) \alpha' \end{aligned} \quad (2.17a)$$

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial T_S^B}{\partial z'} \right| &= \frac{1}{l'} (T_I' - T_M) e^{\frac{z'}{l'}} \\ &= (T_M - T_I') \alpha' \end{aligned} \quad (2.17b)$$

$$\begin{aligned} T_S^A &= T_M + (T_I - T_M) \beta' \\ T_S^B &= T_M + (T_I' - T_M) \beta' \end{aligned} \quad (2.18a)$$

$$(2.18b)$$

とおく。

$$A' = \left| \frac{1}{T_S^A} \cdot \frac{\partial T_S^A}{\partial Z'} \right| = \frac{(T_I - T_M) \alpha'}{T_M + (T_I - T_M) \beta'} \quad (2.19a)$$

$$B' = \left| \frac{1}{T_S^B} \cdot \frac{\partial T_S^B}{\partial Z'} \right| = \frac{(T_I - T_M) \alpha'}{T_M + (T_I - T_M) \beta'} \quad (2.19b)$$

とおいて、

$$\frac{1}{A'} - \frac{1}{B'}$$

を計算する。通分して

$$\text{分母} = (T_M - T_I)(T_M - T_I') \alpha' > 0$$

$$\text{分子} = T_M(T_I - T_I') < 0$$

となり

$$\frac{1}{A'} < \frac{1}{B'}$$

$$B' < A'$$

(2.20)

即ち、

$$\sigma[S]_A > \sigma[S]_B$$

(2.21)

あるいは、

$$\sigma[S]_{T_I} > \sigma[S]_{T_I'}$$

(2.22)

となり、最大成長速度の条件では固相内のエントロピー生成は最小とはならない。従って、界面が独自の質量をもたないとしても、系全体を積分したエントロピー生成が最小になることは保証されない。

以上が、最大成長速度の仮定を非平衡熱力学で検討して得られる結論である。熱力学的安定性を論じることが困難であるとするならば、動力的方法に

頼らなければならない。

3.3 界面の形態的安定性—摂動論

最大成長速度の仮定にかわって実験結果とのよい一致を示すのが動力的方法—界面の形態的摂動を考え、その結果生ずる温度の変化によって界面摂動が拡大するかを判断基準にする—である。デンドライトの問題に界面の形態的安定性を適用したのは、Langer and Muller-Krumbharr [11] である。

以下に、彼らの手続きを簡単に示す。

(1) 全ての変数を無次元化して考える。この際に、

$$\zeta \equiv \frac{2D_{th}c_L T_M \sigma}{Q^2 V \rho^2} \quad (3.1)$$

という無次元パラメータがあらわれる。

(2) И в а н ц о в 放物体で界面摂動を考え、 ζ を系に依存するパラメータとして考える。

(3) ζ を定常状態の $V-\rho$ 曲線に依存するパラメータとして考える。

(4) (2), (3) を結合してコンピュータ計算によって、界面摂動が拡大するか否かで ζ の臨界値を求める。

(5) その結果、 $\zeta < \zeta^*$ ならば界面摂動は拡大しない。計算値は

$$\zeta^* = \begin{cases} 0.020 \pm 0.007 & (2次元モデル) \\ 0.025 \pm 0.007 & (3次元モデル) \end{cases}$$

であった。 $\zeta = \zeta^*$ で実際の凝固が行われているとする。

(6) 定常状態のデンドライト成長モデルとして、Т е м к и н [3]、T r i v e d i [6]、S e k e k a ら [14] を使った。

従来の結果との比較、実験結果との比較はFig. 5であるが、きわめてよい—

致を示している。

4 デンドライトの幾何学的形状はどのようにして決定されるか？

緒言で述べた「結論の繰り込み」を避けるために、過冷却下の液相内に晶出した核がデンドライトとして定常的に成長するまで、各段階を追って問題を考えてみたい。(Fig. 7)

4.1 核生成

まず第一に、過冷却下の液相内に晶出した核が成長しうるのか、それとも再び縮小するのかという問題がある (Fig. 7でA→Bの段階)。核は球形だとし (この仮定は結晶異方性がない場合には妥当であろう)、その半径をRとする。核の中心に原点をとり、極座標 (r, θ, ϕ) を用いて温度場 $T(r, t)$ をあらわす。支配方程式は、

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D_{th} \nabla^2 T \quad (4.1)$$

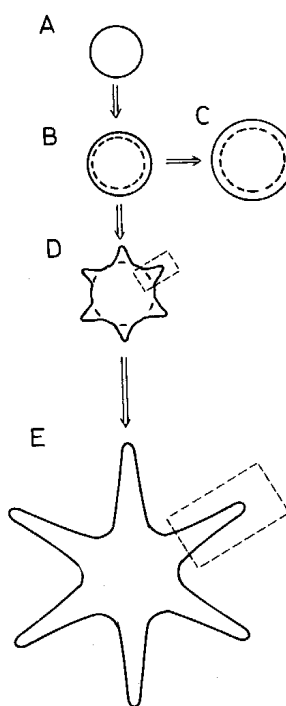


Fig. 7 Schematic illustration of crystal growth from nucleation

ここで、

$$\begin{aligned} \nabla^2 T(ir) = & \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] T(r) \end{aligned} \quad (4.2)$$

である。ところでA→Bの変化では界面の移動は十分ゆっくりであるため、準定常的に取り扱って

$$\frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (4.3)$$

とおく。そうすると、(1.1)～(1.3)は

$$\nabla^2 T(ir) = 0 \quad (4.4)$$

であるが、今の場合、球対称なので

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \right] T = 0 \quad (4.5)$$

となる。境界条件は、

$$\text{固相では} \quad T = T_M \quad \text{at } r = 0 \quad (4.6a)$$

$$T = T_I \quad \text{at } r = R \quad (4.6b)$$

$$\text{液相では} \quad T = T_\infty \quad \text{at } r \rightarrow \infty \quad (4.7a)$$

$$T = T_I \quad \text{at } r = R \quad (4.7b)$$

である。また、 T_I は

$$T_I = T_M - 2\sigma T_M / \gamma_1 Q R = T_M - 2\Gamma / R \quad (4.8)$$

である(2.3の(3.1), (3.2)式)。

(4.5)式は、

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dT}{dr} = 0$$

ここで、 $\frac{dT}{dr} = T'$ とおくと、

$$\frac{dT'}{dr} + \frac{2}{r'} T' = 0$$

$$\frac{1}{T'} \frac{dT'}{dr} = -\frac{2}{r}$$

積分して

$$\log T' = -2 \log r + C_1$$

$$\frac{dT}{dr} = \frac{C_1'}{r^2}$$

さらに積分して

$$T = \frac{C_1}{r} + C_2$$

固相、液相について (4.6), (4.7) より C_1, C_2 を決定すると

$$\text{固相で } T_s = \frac{(T_1 - T_M)R}{r} + T_M \quad (0 \leq r \leq R) \quad (4.9)$$

$$\text{液相で } T_L = \frac{(T_1 - T_\infty)R}{r} + T_\infty \quad (R \leq r < \infty) \quad (4.10)$$

である。

界面における熱収支の式 (2.1.3, (1.27) 式参照) より、

$$Q \frac{dR}{dt} = -\lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial r} \Big|_{r=R} + \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{r=R} \quad (4.11)$$

であるから、(4.9), (4.10) を使って dR/dt を表せる。

$$\frac{\partial T_L}{\partial r} = -\frac{(T_1 - T_\infty)R}{r^2}, \quad \frac{\partial T_s}{\partial r} = -\frac{(T_1 - T_M)R}{r^2}$$

だから

$$\begin{aligned}
 Q \frac{dR}{dt} &= -\lambda_L \left(-\frac{T_I - T_\infty}{R} \right) + \lambda_s \left(-\frac{T_I - T_M}{R} \right) \\
 &= \frac{1}{R} (\lambda_L T_I - \lambda_L T_\infty - \lambda_s T_I + \lambda_s T_M) \\
 &= \frac{1}{R} \left[(\lambda_s T_M - \lambda_L T_\infty) - (\lambda_s - \lambda_L) \left(T_M - \frac{2\Gamma}{R} \right) \right] \\
 &= \frac{1}{R} \left[(\lambda_s T_M - \lambda_L T_\infty) - (\lambda_s - \lambda_L) \left(T_M - \frac{2\Gamma}{R} \right) \right] \\
 &= \frac{1}{R} \left[\frac{2\Gamma(\lambda_s - \lambda_L)}{R} - (\lambda_L T_\infty - \lambda_L T_M) \right]
 \end{aligned}$$

従って

$$\frac{dR}{dt} = \frac{2\Gamma(\lambda_s - \lambda_L)}{RQ} \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{R_c} \right] = \frac{2\Gamma(\lambda_L - \lambda_s)}{RQ} \left[\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \right]$$

$$R_c = \frac{\lambda_L(T_\infty - T_M)}{2\Gamma(\lambda_s - \lambda_L)} = \frac{\lambda_L(T_M - T_\infty)}{2\Gamma(\lambda_L - \lambda_s)} \quad (4.12a)$$

$$(4.12b)$$

ふつう、 $\lambda_L > \lambda_s$ であるから

$$R > R_c \quad (4.13)$$

ならば、

$$\frac{dR}{dt} > 0 \quad (4.14)$$

となり、核は成長しうる。

これが核生成の条件である。

4. 2 界面の摂動

次の段階として生成した核が球状に成長するかそれとも突起を生ずるかの問題がある。即ちFig. 7でB→Cになるか、B→Dになるかの問題である。文献[15]によると、MulleinとSekerka[15]は、過飽和溶湯中の固体(球)

について、以下の式を導いている。過冷溶湯中の固体についても同様な式が記述できると思われる。

界面の動径座標 $r(\theta, \phi)$ が $r=R$ よりわずかに

$$r(\theta, \rho) = R(t) + \delta_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4.15)$$

と変動したとする。 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ は球面調和函数で

$$\begin{aligned} -\left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} \right] Y_{lm}(\theta, \rho) \\ = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \rho) \end{aligned} \quad (4.16)$$

の関係を満たす。

$$\frac{\dot{\delta}_{lm}}{\delta_{lm}} = (l-1) \frac{D_c}{C_0 R^2} \left\{ (C_\infty - C_e) - (l^2 + 3l + 4) \frac{C_e \Gamma_c}{R} \right\} \quad (4.17)$$

C_0 : 固体内の溶質濃度

C_e : 平面界面での平衡濃度

C_∞ : 無限遠方での溶質濃度

Γ_c : Gibbs-Thomson係数

で $\dot{\delta}_{lm} / \delta_{lm} > 0$ ならば界面摂動は拡大し、界面は不安定である。

4. 3 境界層モデルによる近似

次の段階は、微小な摂動による突起が定常的なデンドライトに成長するステップ (fig. 7でD→E) を考えることである。これは移動境界で熱伝導の方程式を解くことであるが、真正直な方法では数値計算によっても不可能である。

そこで「境界層モデル」と呼ばれる方法が採用される。Ben-Jacobら[17]は、境界近傍のみが無限遠点を基準とした「過熱」を持つとし、次の3つの基礎式を立てた。

$$\left[\frac{dH}{dt} \right]_n = V_n(1-u_s - HK) + D_{l,h} \vec{\nabla}_s \cdot H \vec{\nabla}_s \quad (3.1)$$

$$u_s = \Delta - d_0 K \quad (3.2)$$

$$V_n = \frac{Du_s}{l} = \frac{Ddu_s^2}{H} \quad (3.3)$$

ここで、

$$K = - \frac{\partial \theta}{\partial S} \quad (3.4)$$

は長さ S の関数として定義される曲率であり、(Fig. 8)

$$H = \int_0^\infty u dZ \cong du_s l \quad (3.5)$$

は界面の持つ熱容量である (Fig. 9)。また

$$u = cT/Q \quad (\text{無次元温度})$$

d_0 : 毛管長さ

Δ : 無次元化された過冷度

$\vec{\nabla}_s$: 凝固フロントに沿った温度勾配

である。

実際には、初期条件として界面の形を仮定し、(それに伴って、 K の関数の形が初期に設定され)、数値計算を繰り返して界面の形を決定していく。この

ようにして得られた結果をFig. 10に示した。界面には緩やかな摂動があらわれている。

もし、このような試みが更に発展すれば、単一の「針」だけでなく、林立したデンドライトの成長を論ずることもできるであろう。

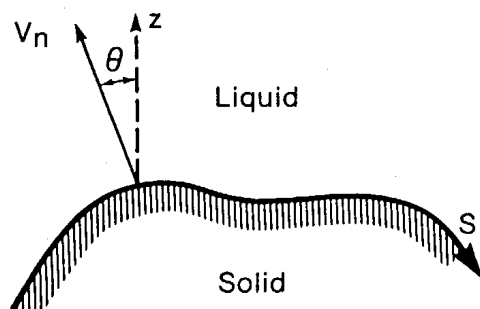


fig.8. Schematic illustration of a solidification front, showing various quantities defined in the text.

Sited from Ref. [17]

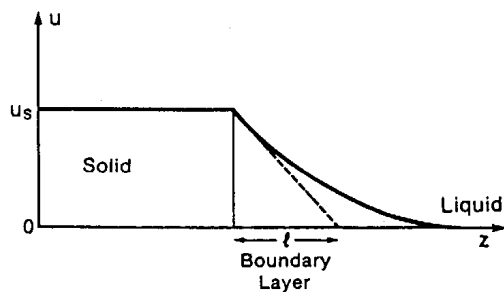


fig.9. Temperature vs z , the distance from the interface along the local normal.

Sited from Ref. [17]

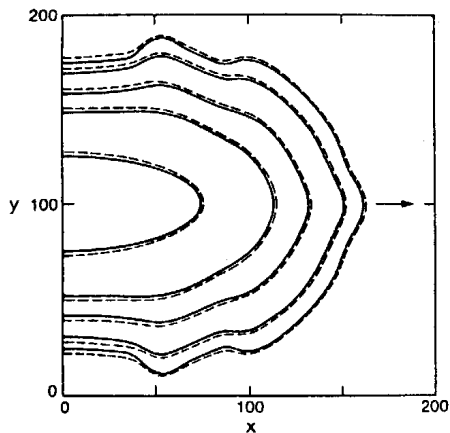


fig.10. Sequence of dendritelike structures with $\Delta = 0.99$, $\varepsilon = 0.25$, and $m = 4$, at times 0, 50, 75, 100, 115. The solid line is the interface; the dashed line is the edge of the boundary layer.

Sited from Ref. [17]

5 結 言

「過冷した溶湯中を成長するデンドライト」の問題を扱い、

- (1) ИВАНЦОВからTrivediに至る解析的記述のモデルを詳細にあとづけた。
- (2) 「最大成長速度の仮定」をエントロピー生成最小（局小）の原理から検討し、それがこの原理を満たし得ない可能性を示した。それは、界面安定性基準の必要性を示すことであった。
- (3) 核生成から、定常状態でのデンドライト成長までの各段階を整理し、今までの研究者の試みを紹介した。

謝辞

本論文の第2章の素材は柴田雄次氏の修士論文 [17] によっている。第3章のエントロピー生成最小原理については、雪田修一氏（稚内北星短大）に助言をいただいた。それぞれに深く感謝する。

Appendix A 回転放物体の結晶での界面の平均曲率

3次元空間の点 (x, y, z') の位置ベクトルを \mathbf{p} とおく、
微分幾何学では [4]、

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}(u, v)$$

と媒介変数 u, v のベクトル関数として表示して議論を進める。
もちろん

$$\mathbf{p} = (x(u, v), y(u, v), z'(u, v))$$

と表示される。

回転放物体座標を使って、

$$x = \rho \xi \eta \cos \theta$$

$$y = \rho \xi \eta \sin \theta$$

$$z' = \frac{\rho}{2} (\xi^2 - \eta^2)$$

と表示され、かつ固液界面で $\xi = 1$ であるから、 $u = \eta$, $v = \theta$ ととり、

$$\mathbf{p}(\eta, \theta) = (\rho \eta \cos \theta, \rho \eta \sin \theta, \frac{\rho}{2} (1 - \eta^2))$$

と置いて、曲面の第一基本量、第二基本量を求める。

$$\mathbf{p}_\eta = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta} = (\rho \cos \theta, \rho \sin \theta, -\rho \eta)$$

$$\mathbf{p}_\theta = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} = (-\rho \eta \sin \theta, \rho \eta \cos \theta, 0)$$

慣習的表記に従って、第一基本量は、

$$E = \mathbf{p}_\eta \cdot \mathbf{p}_\eta = \rho^2 \cos^2 \theta + \rho^2 \sin^2 \theta + \rho^2 \eta^2 = \rho^2 (1 + \eta^2)$$

$$F = \mathbf{p}_\eta \cdot \mathbf{p}_\theta = -\rho^2 \eta \cos \theta \sin \theta + \rho^2 \eta \sin \theta \cos \theta = 0$$

$$G = \mathbf{p}_\theta \cdot \mathbf{p}_\theta = \rho^2 \eta^2 \sin^2 \theta + \rho^2 \eta^2 \cos^2 \theta + 0 = \rho^2 \eta^2$$

第二基本量は、 $\mathbf{p}_{\eta\eta}$, $\mathbf{p}_{\eta\theta}$, $\mathbf{p}_{\theta\theta}$ と、曲面の法線ベクトル：

$$\mathbf{e} = \frac{\mathbf{p}_\eta \times \mathbf{p}_\theta}{|\mathbf{p}_\eta \times \mathbf{p}_\theta|}$$

を使って定義されるから、ベクトル積 $\mathbf{p}_\eta \times \mathbf{p}_\theta$ を求める。

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_\eta \times \mathbf{p}_\theta &= \begin{vmatrix} \mathbf{p}_\eta^y & \mathbf{p}_\eta^z \\ \mathbf{p}_\theta^y & \mathbf{p}_\theta^z \end{vmatrix} \mathbf{i} + \begin{vmatrix} \mathbf{p}_\eta^z & \mathbf{p}_\eta^x \\ \mathbf{p}_\theta^z & \mathbf{p}_\theta^x \end{vmatrix} \mathbf{j} + \begin{vmatrix} \mathbf{p}_\eta^x & \mathbf{p}_\eta^y \\ \mathbf{p}_\theta^x & \mathbf{p}_\theta^y \end{vmatrix} \mathbf{k} \\ &= \begin{vmatrix} \rho \sin\theta & -\rho\eta \\ \rho\eta \cos\theta & \sigma \end{vmatrix} \mathbf{i} + \begin{vmatrix} -\rho\eta & \rho \cos\theta \\ 0 & -\rho\eta \sin\theta \end{vmatrix} \mathbf{j} + \begin{vmatrix} \rho \cos\theta & \rho \sin\theta \\ -\rho\eta \sin\theta & \rho\eta \cos\theta \end{vmatrix} \mathbf{k} \\ &= \mathbf{i} \rho^2 \eta^2 \cos\theta + \mathbf{j} \rho^2 \eta^2 \sin\theta + \mathbf{k} \rho^2 \eta \end{aligned}$$

つづいて、

$$\begin{aligned} |\mathbf{p}_\eta \times \mathbf{p}_\theta| &= \left[\rho^4 \eta^4 \cos^2\theta + \rho^4 \eta^4 \sin^2\theta + \rho^4 \rho^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= (\rho^4 \eta^4 + \rho^4 \eta^2)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

従って、

$$\mathbf{e} = \frac{1}{(1 + \eta^2)^{\frac{1}{2}}} (\eta \cos\theta, \eta \sin\theta, 1)$$

\mathbf{P}_η , \mathbf{P}' の計算と同様に

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{\eta\eta} &= \frac{\partial}{\partial \eta} \mathbf{p}_\eta = (0, 0, -\rho) \\ \mathbf{p}_{\eta\theta} &= \frac{\partial}{\partial \eta} \mathbf{p}_\theta = (-\rho \sin\theta, \rho \cos\theta, 0) \\ \mathbf{p}_{\theta\eta} &= \frac{\partial}{\partial \eta} \mathbf{p}_\theta = (-\rho \sin\theta, \rho \cos\theta, 0) \\ \mathbf{p}_{\theta\theta} &= \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{p}_\theta = (-\rho \eta \cos\theta, -\rho \eta \sin\theta, 0) \end{aligned}$$

慣習的表記を使って、第二基本量は、

$$L = \mathbf{p}_{\eta\eta} \cdot \mathbf{e} = -\frac{\rho}{W}$$

$$M = \mathbf{p}_{\eta\theta} \cdot \mathbf{e} = \frac{1}{W} (-\rho \cos\theta \sin\theta + \rho \cos\theta \sin\theta + 1 \times 0) = 0$$

$$N = \mathbf{p}_{\theta\theta} \cdot \mathbf{e} = \frac{1}{W} (-\rho \eta^2 \cos^2\theta - \rho \eta^2 \sin^2\theta) = -\frac{\rho \eta^2}{W}$$

と表される。ただしここで

$$W = (1 + \eta^2)^{3/2}$$

と置いた。

曲面の平均曲率は、E, F, G, L, M, Nを使って、

$$\begin{aligned} H &= \frac{EN + GL - 2FM}{2(EG - F^2)} \\ &= \frac{\rho^2(1 + \eta^2) \times \left(-\frac{\rho \eta^2}{W}\right) + \rho^2 \eta^2 \times \left(-\frac{\rho}{W}\right) \cdot 2 \times 0 \times 0}{2\{\rho^2(1 + \eta^2) \times \rho^2 \eta^2 - 0^2\}} \\ &= \frac{-\rho^3 \eta^2(1 + \eta^2) - \rho^3 \eta^2}{2W \rho^4(1 + \eta^2) \eta^2} \\ &= \frac{-(\eta^4 + 2\eta^2)}{2W \rho(1 + \eta^2) \eta^2} \\ &= \frac{-(\eta^2 + 2)}{2\rho(1 + \eta^2)^{3/2}} \end{aligned}$$

Appendix B 合流型超幾何方程式 ([7] p.260~280)

合流型超幾何方程式

$$z u'' + (\gamma - z) u' - \alpha u = 0$$

の解は、

$$u = A\Phi(\alpha, \gamma; z) + B\Psi(\alpha, \gamma; z)$$

$$|\arg z| < \pi, \alpha, \gamma \neq 0, -1, -2$$

である。ここで

$$\Phi(\alpha, \gamma; z) = \lim_{\beta \rightarrow 0} F\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(d)_k}{(\gamma)_k} \frac{z^k}{k!}$$

$$|z| < \infty, \gamma \neq 0, -1, -2$$

は第一種の合流型超幾何函数 (confluent hypergeometric function)

$$\Psi(\alpha, \gamma; z) = \frac{\Gamma(1-\gamma)}{\Gamma(1+\alpha-\gamma)} \Phi(\alpha, \gamma; z) + \frac{\Gamma(\gamma-1)}{\Gamma(\alpha)} z^{1-\gamma} \Phi(1+\alpha-\gamma, 2-\gamma; z)$$

$$|\arg Z| < \pi, \gamma \neq 0, \pm 1, \pm 2,$$

は第2種の合流型超幾何函数 (confluent hypergeometric function of the second kind) である。

$$\Psi(\alpha, \gamma; z) = \frac{\pi}{\sin \pi \gamma} \left[\frac{1}{\Gamma(1+\alpha-\gamma)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(d)_k}{\Gamma(\gamma+k)} \frac{Z^k}{k!} - \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(4\alpha-\gamma)_k}{\Gamma(2-\gamma+k)} \frac{Z^{k+1-\gamma}}{k!} \right]$$

$$= \frac{\pi}{\pi \sin \theta} (g_1 - g_2)$$

とおいて、

$$\gamma = n+1$$

のときは

$$\Psi(\alpha, n+1, z) = \lim_{\gamma \rightarrow n+1} (\alpha, \gamma; z) = (-1)^{n+1} \left[\frac{\partial g_1}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=n+1} - \frac{\partial g_2}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=n+1} \right]$$

と定義する。さて、ここで、

$$\Phi(\alpha, \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 e^{zt} t^{\alpha-1} (1-t)^{\gamma-\alpha-1} dt$$

$$\operatorname{Re} \gamma > \operatorname{Re} \alpha > 0 \quad [\text{積分表示}]$$

で

$$t = 1 - s$$

と置換する。

$$\Phi(\alpha, \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} e^z \int_1^0 e^{zs} s^{\gamma-\alpha-1} (1-s)^{\alpha-1} (-ds)$$

$$= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} e^z \int_0^1 e^{zs} s^{\gamma-\alpha-1} (1-s)^{\alpha-1} ds$$

$$= e^z \Phi(\gamma-\alpha, \gamma, -z)$$

即ち、

$$\Phi(\alpha, \gamma; z) = e^z \Phi(\gamma - \alpha, \gamma, -z) \quad [\text{K u m m e r の変換公式}]$$

次に、

$$\Psi(\alpha, \gamma; z) = \frac{\Gamma(1-\gamma)}{\Gamma(\alpha-\gamma+1)} \Phi(\alpha, \gamma; z) + \frac{\Gamma(\gamma-1)}{\Gamma(\alpha)} z^{1-\gamma} \Phi(1+\alpha-\gamma, 2-\gamma; z)$$

で、

$$\alpha \rightarrow \gamma - \alpha, z = -z = ze^{\mp\pi i}$$

の置換を行なう。

$$\begin{aligned} \Psi(\gamma - \alpha, \gamma, -z) &= \frac{\Gamma(1-\gamma)}{\Gamma(1-\alpha)} \Phi(\gamma - \alpha, \gamma; -z) + \frac{\Gamma(\gamma-1)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} (-z)^{1-\gamma} \\ &\quad \times \Phi(1-\alpha, 2-\gamma; -z) \end{aligned}$$

ここで、

$$\Phi(\gamma - \alpha, \gamma, -z) = e^{-z} \Phi(\gamma, \alpha; z)$$

$$\Phi(1-\alpha, \gamma, -z) = e^{-z} \Phi(1+\alpha-\gamma, \gamma; z)$$

$$(-z)^{1-\gamma} = (ze^{\mp\pi i})^{1-\gamma} = -z^{1-\gamma} e^{\pm\gamma\pi i}$$

より

$$\begin{aligned} e^z \Psi(\gamma - \alpha, \gamma; -Z) &= \frac{\Gamma(1-\gamma)}{\Gamma(1-\alpha)} \Phi(\alpha, \gamma; z) + \frac{\Gamma(\gamma-1)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} z^{1-\gamma} e^{\pm\gamma\pi i} \\ &\quad \times \Phi(1+\alpha-\gamma, 2-\gamma; z) \end{aligned}$$

であるから、一般に $\gamma = n + 1$ のとき

$$u = A\Phi(\alpha, e; z) + B\Psi(\alpha, e; z)$$

$$= A'\Phi(\alpha, e; z) + B'e^z \Psi(\gamma - \alpha, \gamma, -z)$$

Appendix C Normalized Integral Error Function

本文 (4.18a) の

$$I_1 = \frac{1}{n!} \int_0^\infty e^{-t^n} \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-2\sqrt{pt}} dt \quad (\text{c.1})$$

で、($p_i = p$ と略記する)

$$t = (u - \sqrt{p})^2, \quad dt = 2(u - \sqrt{p}) du$$

と置換する。

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{n!} \int_{\sqrt{p}}^\infty e^{-(u-\sqrt{p})^2} (u-\sqrt{p})^{2n} \frac{1}{u-\sqrt{p}} e^{-2\sqrt{p}(u-\sqrt{p})} \cdot 2(u-\sqrt{p}) du \\ &= \frac{2}{n!} \int_{\sqrt{p}}^\infty e^{-(u-\sqrt{p})^2} (u-\sqrt{p})^{2n} e^{-2\sqrt{p}(u-\sqrt{p})} du \\ &= \frac{2}{n!} \int_{\sqrt{p}}^\infty e^{-(u^2-2u\sqrt{p}+p)} e^{-2\sqrt{p}u+2p} (u-\sqrt{p})^{2n} du \\ &= \frac{2e^p}{n!} \int_{\sqrt{p}}^\infty e^{-u^2} (u-\sqrt{p})^{2n} du \end{aligned}$$

ここで再び

$$u - \sqrt{p} = v$$

と置換すると、

$$I_1 = \frac{2e^p}{n!} \int_0^\infty e^{-(v+\sqrt{p})^2} v^{2n} dv \quad (\text{c.2})$$

である。normalized integral error functionを

$$I_{2n} \operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)} \int_0^\infty e^{-(t+x)^2} t^{2n} dt \quad (\text{c.3})$$

で定義しておく、

$$I_1 = e^p \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} I_{2n} \operatorname{erfc}(\sqrt{p}) \quad (\text{c. 4})$$

となる、なお、

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (\text{c. 5})$$

であり、

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi}$$

$$((2n-1)!! = (2n-1)(2n-3) \cdots 3 \cdot 1 \quad (\text{c. 6})$$

である。 I_2 を求めるために、 $\partial I_1 / \partial p$ を求めるが、この際

$$\mathfrak{S}_{2n}(x) = \int_0^\infty e^{-(t+x)^2} t^{2n} dt$$

という正規化されていない関数をそのまま使った方が便利である。

$$\begin{aligned} \frac{d\mathfrak{S}_{2n}(x)}{dx} &= \int_0^\infty t^{2n} \left[\frac{d}{dx} e^{-(t+x)^2} \right] dt \\ &= \int_0^\infty t^{2n} e^{-(t+x)^2} (-2t-2x) dt \\ &= -2 \int_0^\infty t^{2n+1} e^{-(t+x)^2} dt - 2x \int_0^\infty t^{2n} e^{-(t+x)^2} dt \\ &= -2\mathfrak{S}_{2n+1}(x) - 2x\mathfrak{S}_{2n}(x) \end{aligned} \quad (\text{c. 7})$$

ここで、

$$\begin{aligned} I_2 &= -2 \frac{\partial I_1}{\partial p} \\ &= -2 \frac{\partial}{\partial p} \left[\frac{2e^p}{\Gamma(n+1)} \mathfrak{S}_{2n}(\sqrt{p}) \right] \\ &= -\frac{4e^p}{\Gamma(n+1)} \mathfrak{S}_{2n}(\sqrt{p}) - \frac{4e^p}{\Gamma(n+1)} \left\{ \frac{\partial}{\partial(\sqrt{p})} \mathfrak{S}_{2n}(\sqrt{p}) \right\} \frac{\partial \sqrt{p}}{\partial p} \\ &= -\frac{4e^p}{\Gamma(n+1)} \mathfrak{S}_{2n}(\sqrt{p}) - \frac{4e^p}{\Gamma(n+1)} \frac{1}{2\sqrt{p}} \left\{ -2\mathfrak{S}_{2n+1}(\sqrt{p}) - 2\sqrt{p} \mathfrak{S}_{2n}(\sqrt{p}) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{4e^p}{\Gamma(n+1)} \mathfrak{E}_{2n}(\sqrt{p}) + \frac{4e^p}{\sqrt{p} \Gamma(n+1)} \mathfrak{E}_{2n+1}(\sqrt{p}) + \frac{4e^p}{\Gamma(n+1)} \mathfrak{E}_{2n}(\sqrt{p}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{p}} \frac{4e^p}{\Gamma(n+1)} \mathfrak{E}_{2n}(\sqrt{p}) \\
&= \frac{4e^p}{\sqrt{p} \Gamma(n+1)} \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)}{2} \left[\frac{2}{\Gamma\left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)} \mathfrak{E}_{2n+1}(\sqrt{p}) \right] \\
&= \frac{2e^p}{\sqrt{p}} I_{2n+1} \operatorname{erfc}(\sqrt{p})
\end{aligned}$$

Appendix D 合流型超幾何函数のベッセル函数による積分表示

$$\Phi(\alpha, \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} e^z z^{(1-\gamma)/2} \int_0^\infty e^{-t} t^{\gamma/2(\gamma-1)-\alpha} J_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) dt$$

$$\operatorname{Re}(\gamma - \alpha) > 0, |\arg z| < \pi, \gamma = 0, -1, -2, \dots$$

の証明

$$J_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (\sqrt{zt})^{\gamma+2k-1}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\gamma)}$$

$$e^{-t} t^{\gamma/2(\gamma-1)-\alpha} J_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) = e^{-t} t^{\gamma/2(\gamma-1)-\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (\sqrt{zt})^{\gamma+2k-1}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\gamma)}$$

$$\int_0^\infty e^{-t} t^{\gamma/2(\gamma-1)-\alpha} J_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) dt = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k z^{\frac{1}{2}(\gamma+2k-1)}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\gamma)} \int_0^\infty e^{-t} t^{\gamma-k-1-\alpha} dt$$

$$= z^{\frac{1}{2}(\gamma-1)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\gamma+k-\alpha)}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\gamma)} (-z)^k$$

$$= z^{\frac{1}{2}(\gamma-1)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\gamma-\alpha)_k \Gamma(\gamma-\alpha)}{k! (\gamma)_k \Gamma(\gamma)} (-z)^k$$

$$= \frac{\Gamma(\gamma-\alpha)}{\Gamma(\gamma)} z^{\frac{1}{2}(\gamma-1)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\gamma-\alpha)_k}{(\gamma)_k} \frac{(-z)^k}{k!}$$

$$= \frac{\Gamma(\gamma-\alpha)}{\Gamma(\gamma)} z^{\frac{1}{2}(\gamma-1)} \Phi(\gamma-\alpha, \gamma, -z)$$

$$= \frac{\Gamma(\gamma-\alpha)}{\Gamma(\gamma)} z^{\frac{1}{2}(\gamma-1)} e^{-z} \Phi(\alpha, \gamma, z)$$

$$\text{よって } \Phi(\alpha, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} e^z z^{(1-\gamma)/2} \int_0^\infty e^{-t} t^{\gamma/2(\gamma-1)-\alpha} J_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) dt$$

$$\text{ii) } \boxed{\Psi(\alpha, \gamma, z) = \frac{2z^{(1-\gamma)/2}}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\alpha-\gamma+1)} \int_0^\infty e^{-t} t^{\alpha-\frac{1}{2}(1+\gamma)} K_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) dt,}$$

$$\text{Re } \alpha > 0, \text{Re}(\alpha - \gamma) > -1, |\arg z| < \pi$$

の証明

$$K_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\gamma+1}(2\sqrt{zt}) - I_{\gamma-1}(2\sqrt{zt})}{\sin(\gamma-1)\pi}$$

$$= \frac{\pi}{2\sin(\gamma-1)\pi} \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\sqrt{zt})^{-\gamma+2k+1}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k-\gamma+2)} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\sqrt{zt})^{\gamma-1+2k}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\gamma)} \right\}$$

$$e^{-t} t^{\alpha-\frac{1}{2}(1+\gamma)} K_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) = \frac{\pi}{2} \frac{1}{\sin(\gamma-1)\pi} \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{\frac{1}{2}(1-\gamma)+k} e^{-t} t^{\alpha-\gamma+k}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+2-\gamma)} \right. \\ \left. - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{\frac{1}{2}(\gamma-1)+2k} e^{-t} t^{\alpha-1+k}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\gamma)} \right\}$$

積分する

$$\int_0^\infty e^{-t} t^{\alpha-\frac{1}{2}(1+\gamma)} K_{\gamma-1}(2\sqrt{zt}) dt$$

$$= \frac{\pi}{2\sin(\gamma-1)\pi} \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{\frac{1}{2}(1-\gamma)+k}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+2-\gamma)} \int_0^\infty e^{-t} t^{\alpha-\gamma+k} dt \right. \\ \left. - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{\frac{1}{2}(\gamma-1)+k}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\gamma)} \int_0^\infty e^{-t} t^{\alpha-1+k} dt \right\}$$

$$= \frac{\pi}{2\sin(\gamma-1)\pi} \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{\frac{1}{2}(1-\gamma)+k}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+2-\gamma)} \Gamma(\alpha-\gamma+k+1) \right. \\ \left. - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{\frac{1}{2}(\gamma-1)+k}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\gamma)} \Gamma(\alpha+k) \right\}$$

$$= \frac{\pi}{2\sin(\gamma-1)\pi} \left\{ z^{\frac{1}{2}(1-\gamma)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha-\gamma+k+1)}{k!\Gamma(k+2-\gamma)} z^k - z^{\frac{1}{2}(\gamma-1)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+k)z^k}{k!\Gamma(k+\gamma)} \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-\pi}{2\sin\pi\gamma} \left\{ z^{(1-\tau)/2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha-\gamma+k+1)_k}{k!(2-\gamma)_k} z^k \frac{\Gamma(\alpha-\gamma+1)}{\Gamma(2-\gamma)} \right. \\
&\quad \left. - z^{(\tau-1)/2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_k z^k}{k!(\gamma)_k} \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\gamma)} \right\} \\
&= \frac{-\pi}{2\sin\pi\gamma} \left\{ z^{(1-\tau)/2} \frac{\Gamma(\alpha-\gamma+1)}{\Gamma(2-\gamma)} \Phi(1+\alpha-\gamma, 2-\gamma, Z) \right. \\
&\quad \left. - z^{(\tau-1)/2} \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\gamma)} \Phi(\alpha, \gamma, Z) \right\} \\
&= \frac{\pi z^{(\tau-1)/2}}{2\sin\pi\gamma} \left\{ \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\gamma)} \Phi(\alpha, \gamma; z) - z^{1-\tau} \frac{\Gamma(\alpha-\gamma+1)}{\Gamma(2-\gamma)} \Phi(1-\alpha-\gamma, 2-\gamma, z) \right\} \\
&= \frac{\pi z^{(\tau-1)/2}}{2\sin\pi\gamma} \left\{ \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\gamma)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_k z}{(\gamma)_k k!} - z^{1-\tau} \frac{\Gamma(\alpha-\gamma+1)}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(1+\alpha-\gamma)_k z^k}{(2-\gamma)_k k!} \right\} \\
&= \frac{\pi z^{(\tau-1)/2}}{2\sin\pi\gamma} \left\{ \Gamma(\alpha) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+k)}{\Gamma(\alpha)1-(k+\gamma)} \frac{z^k}{k!} - \Gamma(\alpha-\gamma+1) \times \right. \\
&\quad \left. \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(1+\alpha-\gamma+k)}{\Gamma(1+\alpha-\gamma)\Gamma(2-\gamma+k)} z^{k+1-\tau} \right\} \\
&= \Gamma(\alpha)\Gamma(1+\alpha-\gamma) z^{(\tau-1)/2} \frac{\pi}{2\sin\pi\gamma} (g_1 - g_2) \\
&= \Gamma(\alpha)\Gamma(1+\alpha-\gamma) \frac{z^{(\tau-1)/2}}{2} \Psi(\alpha, \gamma; z) \\
\text{よって } \Psi(\alpha, \gamma; z) &= \frac{2z^{(1-\tau)/2}}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\alpha-\gamma+1)} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{\alpha-\frac{1}{2}(1+\tau)} K_{\tau-1}(2\sqrt{zt}) dt
\end{aligned}$$

Reference

- [1] Г. П. Иванцов, Доклады Академии
Наук СССР Том 58 (1947), No.4 567
- [2] 森口繁一, 宇田川銓久, 一松信「数学公式I」, 岩波全書
- [3] Д. Е. Темкин, Доклады Академии
Наук СССР Том 132 (1960), No.6 1307
- [4] 小林昭七, 「曲線と曲面の微分幾何」裳華房 (1988) 第14版
- [5] B. Chalmers, 岡本平・鈴木章訳, 「金属の凝固」丸善 p.124,125
- [6] R. Trivedi, Acta Metall., vol. 18, (1970), 287
- [7] N. N. Lebedev, " Special Functions and Their Applications" ,
Prentice-Hall (1965)
- [8] 吉田耕作, 「積分方程式論 (第2版)」, 岩波全書
- [9] 森口繁一, 宇田川銓久, 一松信「数学公式III」岩波全書
- [10] B. S. Berlyand, R. I. Gavriloza and A. P. Prudnikov, " Tables of
Integral Error Functions and Hermite Polynomials", Machmillan
(1962)
- [11] J. S. Langer and H. Muller-Krumbhaar, Acta Metall., vol. 26,
(1978), 1681
- [12] I. Prigogine, Bull. Classe Sci. Acad. Roy. Berg., vol. 31 (1945),
600
- [13] グランドルフ、プリゴジヌ著、松本元・竹山協三訳、『構造・安定性
・ゆらぎ』、みすず書房
- [14] R. F. Sekerka, R. G. Seinstiker, D. R. Hamilton, and J. D. Harri-
son, " Investigation of Desalzinatin by Freezing" , Chapter 3,
Westinghouse Research Laboratory Report (1967)
- [15] 高安秀樹 編著 『フラクタル科学』 朝倉書店
- [16] W. W. Mullins and R. F. Sekerka, J. Appl. Phys., vol. 34, (1963),

323

- [17] E. Ben-Jacob, Nigel Goldenfield, J. S. Langer, and Gerd Schön Phys. Rev. A, vol. 29, (1984), 330
- [18] 柴田雄次、東京大学大学院工学系研究科金属工学専門課程・修士論文、1980. 3